

Grundprinzipien der Quantenmechanik

Michael Zirpel (mzirpel@qlwi.de)

Die folgende Darstellung der Grundprinzipien der Quantenmechanik (QM) basiert grundsätzlich auf v. Neumann [1932]. Allerdings wurden Bezeichnungen modernisiert und neuere Ergebnisse hinzugefügt¹. Unscharfe, verallgemeinerte Observablen werden ebenso behandelt wie offene Systeme und Dekohärenz. Zustände werden dabei durch Dichteoperatoren repräsentiert².

Weiterhin wird versucht, die Theorie getrennt von der Interpretation darzustellen. Zu diesem Zweck werden die Sätze der Theorie in der interpretationsneutralen Sprache der Wahrscheinlichkeitstheorie formuliert³. Als *Minimalinterpretation* (MI) wird die Interpretation der verwendeten Grundbegriffe in physikalischen Experimenten skizziert, wobei auch einige historisch bedeutsame Experimente aufgeführt werden. Dabei soll auch verdeutlicht werden, dass die QM bei allen philosophischen Problemen, die sie aufwerfen mag, eine bestens bewährte physikalische Theorie darstellt.

In den Abschnitten 1 bis 3 werden die Grundprinzipien der *abstrakten* QM (vgl. v. Weizsäcker, 1985) behandelt, die prinzipiell in jeder quantenphysikalischen Theorie gelten (vgl. Weinberg, 1995). In Abschn. 4 werden einige elementare Ergebnisse der nicht-relativistischen Teilchenmechanik betrachtet, wobei auch der Bezug zur klassischen Newtonschen Mechanik beleuchtet wird. Dem umstrittenen Reduktions-/Projektions-/Kollapspostulat wird zusammen mit dem Messprozess ein separates Kapitel eingeräumt.

1 Stochastik: Observablen, Zustände, Erwartungswerte

Jedem *System* wird ein separabler, komplexer Hilbertraum⁴ \mathcal{H} zugeordnet, wobei die *Observablen* des Systems durch selbstadjungierte Operatoren im Hilbertraum \mathcal{H}

$$\mathcal{O} \subseteq \mathcal{O}(\mathcal{H}) = \{X \in \mathcal{D}(\mathcal{H}) \mid X = X^\dagger\},$$

die *Zustände* dagegen durch Dichteoperatoren auf dem Hilbertraum \mathcal{H}

$$\mathcal{S} \subseteq \mathcal{S}(\mathcal{H}) = \{W \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \mid W = W^\dagger, \text{tr}(W) = 1, W \geq 0\}$$

dargestellt⁵ werden. Für ein System im Zustand $W \in \mathcal{S}$ ist der Erwartungswert der Observablen $X \in \mathcal{O}$

$$\langle X \rangle_W = \text{tr}(W X) \tag{1.1}$$

¹vgl. Busch et al. [1995], Ballentine [1998], Nielsen and Chuang [2000], de Muynck [2002], Breuer and Petruccione [2002]

²Ein neueres Plädoyer dafür findet sich in Weinberg [2014].

³Dabei sind unterschiedliche Interpretationen des Wahrscheinlichkeitsbegriffs (vgl. Gillies, 2000) möglich.

⁴bzgl. der mathematischen Begriffe und Notation s. Anhang “Hilbertraum und lineare Operatoren im Hilbertraum”.

⁵In der elementaren Quantenmechanik können alle selbstadjungierten Operatoren im Hilbertraum als Observablen und alle Dichteoperatoren auf dem Hilbertraum als Zustände betrachtet werden, d.h. $\mathcal{O} = \mathcal{O}(\mathcal{H}), \mathcal{S} = \mathcal{S}(\mathcal{H})$.

Dies ist für Systeme mit *Superauswahlregeln* nicht möglich, dort müssen die Mengen \mathcal{O} und \mathcal{S} eingeschränkt werden. Dabei ist zu fordern, dass die beschränkten Observablen $\hat{\mathcal{O}} \subseteq \mathcal{O}$ durch die hermiteschen Elemente einer vollständigen C*-Algebra von Operatoren und die Zustandsoperatoren \mathcal{S} durch die Erwartungswertfunktionale auf $\hat{\mathcal{O}}$ gegeben sind. Für die unbeschränkten Observablen in \mathcal{O} müssen alle Projektoren der zugehörigen PVMs in $\hat{\mathcal{O}}$ liegen.

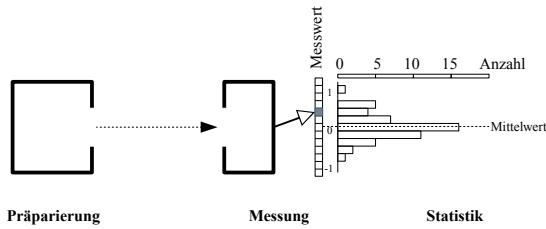
Zur Vereinfachung der mathematischen Verhältnisse betrachtet man oftmals nur die Teilmenge der *beschränkten Observablen*⁶

$$\widehat{\mathcal{O}} \subseteq \widehat{\mathcal{O}}(\mathcal{H}) = \{ X \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \mid X = X^\dagger \} \subset \mathcal{O}(\mathcal{H})$$

MI:

Werden Aussagen der Theorie im Experiment überprüft, so erfolgt das in der Regel mittels statistischer Versuchsreihen, in denen ein Einzelexperiment häufig genug wiederholt wird, sodass man zu statistisch signifikanten Aussagen gelangt.

Für jedes Einzelexperiment wird ein einzelnes Exemplar des untersuchten *Systems* so *präpariert*, dass der *Zustand* W des Systems dadurch festgelegt ist. Die Präparierung erfolgt mittels einer Apparatur (z.B. Teilchenbeschleuniger) und hängt von gewissen Parametern (z.B. Geometrische Anordnung, Beschleunigerspannung, ...) ab, die in der Regel nur unvollständig kontrolliert werden können. Mittels einer Messapparatur (z.B. Zählrohr) wird dann an dem System der *Wert* einer (oder gleichzeitig mehrerer) *Observablen* X (z.B. der Ortskoordinaten X, Y, Z) *gemessen*.



Wird das Einzelexperiment in einer *statistischen Versuchsreihe* wiederholt, ist es wichtig, dass sich die einzelnen Wiederholungen gegenseitig nicht beeinflussen und *statistisch unabhängig* voneinander sind. Der *Mittelwert* der *Messergebnisse* x_1, \dots, x_n sollte dann "nahe" beim theoretisch durch (1.1) gegebenen *Erwartungswert* der *Observablen* $\langle X \rangle_W$ liegen, wenn das Einzelexperiment oft genug wiederholt wird ($n \rightarrow \infty$)

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k \approx \langle X \rangle_W$$

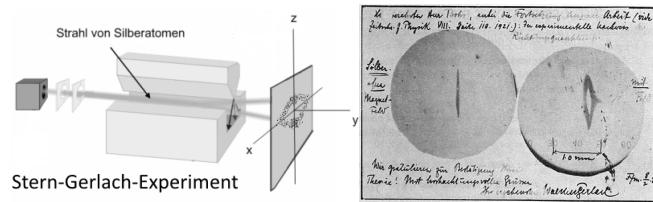
Die Methoden der Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik ermöglichen präzisere Aussagen darüber, inwieweit Versuchsergebnisse theoretische Aussagen bestätigen (vgl. D'Agostini [2003]). Eine entsprechende Methodik setzt nicht notwendig eine *frequentistische Interpretation* des Wahrscheinlichkeitsbegriffs voraus, auch wenn diese oftmals mit der Minimalinterpretation verbunden wird (wie z.B. bei Ballentine [1998] und Ludwig [1983]) - eine Verbindung, die dann auch als *Ensembleinterpretation* bezeichnet wird. Die Ermittlung der relativen Häufigkeit kann aber auch als *Messung* einer auf andere Weise definierten *objektiven/ontischen Wahrscheinlichkeit* bzw. *Propensität* verstanden werden (vgl. Gillies, 2000, Kap.7). Andererseits können alle Experimente auch *Bayesianisch* als Methode der Informationsgewinnung eines handelnden Subjekts (Agenten) betrachtet werden (vgl. Caves et al., 2002). Wahrscheinlichkeiten werden dann *epistemisch* interpretiert, entweder als *intersubjektive/objektive Quantifizierung* der vorhandenen Information (vgl. Jaynes, 2003) oder einfach als Ausdruck der *subjektiven* Überzeugung eines Agenten wie z.B. im *QBism* (vgl. Fuchs et al. [2014]).

Die statistische Interpretation der Zustände in der QM geht auf Born [1926] zurück und war Ausgangspunkt der *Kopenhagener Interpretation* von Bohr und Heisenberg, deren Wahrscheinlichkeitsbegriff sowohl epistemische (subjektive) als auch ontische (objektive) Elemente aufweist (vgl. Heisenberg, 1959).

⁶Da ein unbeschränkter Operator X nicht im ganzen Hilbertraum definiert ist und auch die Spur eines solchen Operators nicht immer existiert, stellen sich Existenzfragen bzgl. $\text{tr}(XW)$. Es ist daher einfacher, nur beschränkte Operatoren auf dem Hilbertraum zu betrachten. Diese bilden eine C^* -Algebra, die sich bzgl. der algebraischen Operationen gutartig verhält, sodass XW für alle $X \in \widehat{\mathcal{O}}(\mathcal{H})$ und alle $W \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ auf ganz \mathcal{H} definiert ist und $\text{tr}(XW)$ immer existiert. Diese Einschränkung der Observablen hat den Schönheitsfehler, dass die üblichen Lehrbuch-Operatoren für Ort, Impuls und Energie nicht dazugehören, da sie alle unbeschränkt sind. Es können aber beschränkte Operatoren angegeben werden, die diese in gewissen Sinn approximieren. In der Quanteninformatik sind die Verhältnisse unkompliziert, da man dort ausschließlich endlichdimensionale Hilberträume (für n Qubits $\mathcal{H} = \mathbb{C}^{2^n}$) verwendet, in denen alle linearen Operatoren $(\mathbb{C}^{2^n} \times \mathbb{C}^{2^n} - \text{Matrizen})$ beschränkt sind.

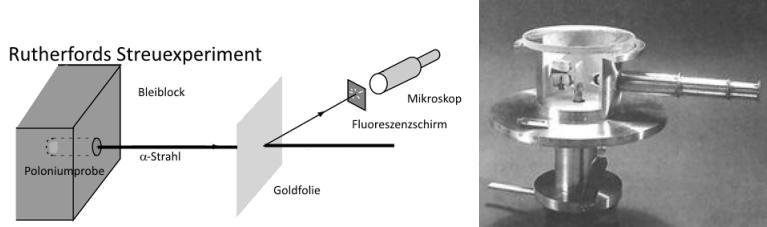
MI:

Diese Darstellung eines Experiments ist natürlich hochgradig vereinfacht. In vielen Experimenten, in denen die quantenmechanische Beschreibung eines Systems z.B. eines Teilchens, untersucht werden soll, wird von vorneherein eine *unbestimmte große Anzahl* verwendet, z.B. "Teilchenstrahlen", an denen dann makroskopische Phänomene beobachtet werden. Oftmals wird dabei bereits durch die Messmethode eine Summe bzw. ein Mittelwert gebildet. Ein einfaches Beispiel liefert das Stern-Gerlach-Experiment (Gerlach and Stern 1922), bei dem mit Hilfe eines Ofens und rotierender Lochscheiben ein Strahl von Silberatomen präpariert wurde. Traf dieser auf ein Glasplättchen, so bildete sich nach einer Weile ein sichtbarer, streifenförmiger Silberfleck heraus. Wurde beim Experiment ein inhomogenes Magnetfeld angelegt, so bildeten sich zwei Streifen (s. Fotos auf der Postkarte von W. Gerlach an N. Bohr). Das Experiment wurde später als wiederholte Spin-Messung an *einzelnen* Silberatomen interpretiert: die beiden Streifen werden von Atomen mit unterschiedlichen Spinwerten gebildet, die Stärke des Silberbelags auf dem Glasplättchen gibt Aufschluss über die Aufschlagwahrscheinlichkeit.



In der Auswertung werden also die Ergebnisse auf eine große Zahl von Einzelexperimenten mit jeweils einem einzelnen Teilchen zurückgeführt. Dies ist natürlich nur dann möglich, wenn sich die Teilchen gegenseitig im Experiment nicht nennenswert beeinflussen. Experimentell kann letzteres dadurch überprüft werden, dass man die Intensität des Teilchenstrahls und die Versuchsdauer variiert.

Aber auch die Beobachtung *einzelner* Teilchen war von Anfang an eine wichtige Erkenntnisquelle für die Quantenphysik. Schon in Rutherford's berühmten Streuexperimenten mit Alphateilchen (Heliumkernen), die von einem radioaktiven Präparat ausgesandt und an den Atomkernen einer dünnen Goldfolie gestreut wurden, wurde das vereinzelte "Aufblitzen" von Lichtpunkten an einem Szintillationsschirm als Einschlag je eines einzelnen Teilchens gedeutet. Rutherford's Mitarbeiter Marsden und Geiger zählten diese Szintillationen am Anfang unter einem Mikroskop noch "per Hand", vgl. Rutherford [1911]. Rutherford's klassische Streuformel konnte dann die winkelabhängige Statistik der Teilcheneinschläge erklären.



Von Anfang bis Ende kontrollierte Experimente mit einzelnen zeitweise isolierten Quantensystemen sind heute möglich, stellen aber eine große technische Herausforderung dar, wie die Schwierigkeiten bei der Entwicklung eines Quantencomputers zeigen. Die Abschirmung der Quantensysteme ist auch im Hochvakuum niemals perfekt; nur für kurze Zeitspannen lassen sich vollständig kontrolliert Ergebnisse gewinnen. Generell kann nur ein geringer Teil der theoretisch möglichen Zustände bzw. Observablen präpariert bzw. direkt gemessen werden. Es erfordert daher i.A großen technischen Aufwand und Erfindungsreichtum der Experimentatoren, theoretische Aussagen der Quantenmechanik überprüfbar zu machen, sowie oftmals komplexe statistische Methoden für den Vergleich der Messergebnisse mit der Theorie.

1.1 Wahrscheinlichkeitsmaß und PVM

Für jede Observable $X \in \mathcal{O}$ ist umkehrbar eindeutig ein projektionswertiges Maß *PVM* (*projection valued measure*) auf den Borelmengen $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ der reellen Zahlen \mathbb{R} definiert

$$P_X : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \rightarrow \widehat{\mathcal{O}}, A \mapsto P_X(A),$$

das jeder Borelmenge $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ einen Projektionsoperator $P_X(A) \in \widehat{\mathcal{O}}$ zuordnet, wobei gilt

$$P_X(\emptyset) = 0, P_X(\mathbb{R}) = 1$$

sowie für jede abzählbare Kollektion von paarweise disjunkten Borelmengen $\{A_k \in \mathcal{B}(\mathbb{R})\}_{k \in I}$ mit Indexmenge I für alle $j, k \in I$

$$P_X(A_j)P_X(A_k) = \delta_{j,k}P_X(A_k)$$

$$P_X\left(\bigcup_{k \in I} A_k\right) = \sum_{k \in I} P_X(A_k)$$

Für alle $A, B \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ kommutieren daher die zugehörigen Projektoren

$$[P_X(A), P_X(B)] = 0$$

und für jeden Zustand $W \in \mathcal{S}$ definiert

$$p_{X,W} : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \rightarrow [0, 1], A \mapsto p_{X,W}(A) = \text{tr}(W P_X(A)) \quad (1.2)$$

ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf dem Ereignisraum (Messraum) der Borelmengen der reellen Zahlen $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$. Für den Erwartungswert der Zufallsvariablen $\tilde{X} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} : x \mapsto x$ im Wahrscheinlichkeitsraum $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}), p_{X,W})$ gilt dabei

$$\langle \tilde{X} \rangle_{p_{X,W}} = \int x \, dp_{X,W} = \int x \, d(\text{tr}(WP_X)) = \text{tr}(W \int x \, dP_X) = \text{tr}(W X) = \langle X \rangle_W$$

Der Projektionsoperator $P_X(A)$ ist für jedes $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ eine *Indikatorobservable* (*Ja/Nein-Observable*) mit den Eigenwerten $\sigma(P_X(A)) \subseteq \{0, 1\}$ und repräsentiert das Ereignis, dass der Wert x der Observablen X in der Menge A liegt. Statt $p_{P_X(A), W}(\{1\})$ schreiben wir auch $p_W(P_X(A))$.

MI:

Bei der Durchführung von Experimenten wird angenommen, dass die *Messung* einer Observablen $X \in \mathcal{O}$ an einem System im Zustand $W \in \mathcal{S}$ ein *Zufallsexperiment* im Sinne der Wahrscheinlichkeitstheorie darstellt, in dem “zufällig” eine Zahl $x_m \in \mathbb{R}$, der Messwert, ermittelt wird. Der zugehörige Ereignisraum ist dann $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$. Die zentrale Annahme, dass $p_{X,W}(A)$ die Wahrscheinlichkeit für das Ereignis, dass das *Messergebnis* x_m in der Menge $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ liegt, angibt, wird auch als Bornsche Regel (nach Born [1926]) bezeichnet.

Born formulierte diese Regel, um Streuexperimente, wie sie Rutherford durchgeführt hatte, quantenmechanisch mittels Schrödingers Wellenfunktion zu erklären. In den Experimenten wurden punktförmige Teilcheneinschläge gezählt, während die Wellenfunktion ein Wertekontinuum angab. Mit Hilfe der Bornschen Regel konnten daraus die Wahrscheinlichkeit der Einschläge, z.B. bei Rutherfords Streuexperimenten [Wentzel, 1926] quantenmechanisch berechnet werden; Rutherfords Formel basierte dagegen noch auf der klassischen Mechanik, die in diesem Fall eine gute Näherung darstellt. $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}), p_{X,W})$ ist der Wahrscheinlichkeitsraum des Zufallsexperiments. Die möglichen Messwerte der Observablen X sind durch das Spektrum des Operators $\sigma(X) \subseteq \mathbb{R}$ gegeben, das für beschränkte Observablen beschränkt ist. Man kann die Ereignisalgebra und den Wahrscheinlichkeitsraum auch auf $(\sigma(X), \mathcal{B}(\sigma(X)), p_{X,W})$ einschränken.

Die Messung der Observablen wird dabei dahingehend idealisiert, dass Fehler, Ungenauigkeiten, Auflösungsvermögen und Skalenbegrenzung der Messgeräte nicht berücksichtigt werden. Man geht vereinfachend davon aus, dass beliebig große Werte der Observablen, fehlerfrei und beliebig genau gemessen werden.

Häufig werden in Beispielen diskrete Observablen verwendet, die aus einer *orthogonalen Zerlegung der Einheit* (ODI, orthogonal decomposition of identity), d.h. einer abzählbaren Menge von paarweise orthogonalen Projektionsoperatoren $\{P_k \in \widehat{\mathcal{O}}\}_{k \in I}$ mit Indexmenge I definiert werden, sodass für alle $j, k \in I$

$$P_j P_k = \delta_{j,k} P_k$$

$$\sum_{k \in I} P_k = 1$$

Mit jeder Funktion $f : I \rightarrow \mathbb{R}, k \mapsto f(k) = f_k$ kann dann ein PVM definiert werden durch

$$E : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{P}(\mathcal{H}), A \mapsto P(A) = \sum_{k \in f^{-1}(A)} P_k$$

sowie der zugehörige selbstadjungierte Operator durch

$$F = \sum_{k \in I} f_k P_k$$

Effekte, unscharfe Observablen und POVMs

“Unscharfe” (verallgemeinerte) Observablen geben die Eigenschaften tatsächlicher, mit Unsicherheiten behafteter Messungen besser wieder. In manchen Fällen ist es zudem in der Theorie nicht möglich, geeignete “scharfe” Observablen zur Beschreibung von Messungen zu definieren. Daher werden in moderneren Darstellungen der QM (vgl. Ludwig [1983], Busch et al., 1995, Nielsen and Chuang [2000], de Muynck [2002]) unscharfe Observablen oftmals an den Anfang gestellt. Ausgangspunkt sind dabei die Effektoperatoren, die eine “unscharfe” Verallgemeinerung der Projektionsoperatoren bilden. Ein selbstadjungierter Operator $E \in \hat{\mathcal{O}}(\mathcal{H})$ ist ein *Effektoperator* gdw. für alle $W \in S(\mathcal{H})$

$$0 \leq \text{tr}(EW) \leq 1$$

Jeder Projektionsoperator ist auch ein Effektoperator $\mathcal{P}(\mathcal{H}) \subseteq \mathcal{E}(\mathcal{H})$. Die Menge der Effektoperatoren auf \mathcal{H} wird mit $\mathcal{E}(\mathcal{H})$ bezeichnet, mit $\mathcal{E} \subseteq \mathcal{E}(\mathcal{H})$ bezeichnen wir die Effekte in $\hat{\mathcal{O}}$. Jedem Projektionsoperator $P \in \mathcal{P}(\mathcal{H})$ können weitere Effektoperatoren $E = pP$ mit $0 \leq p \leq 1$ zugeordnet werden.

MI:

Der Wert $\text{tr}(EW)$ wird als Wahrscheinlichkeit interpretiert, dass bei einer entsprechenden Messung der Effekt E eintritt (z.B. der Detektor anspricht).

Ist beispielsweise bei einem Teilchen der Projektionsoperator $P_V \in \mathcal{O}$ die Indikatorobservable für ein bestimmtes Raumvolumen V , so würde ein idealer Detektor für dieses Volumen für jeden Zustand W ansprechen, für den $\text{tr}(WP_V) = 1$ gilt. Man interpretiert daher den Zustand W so, dass das Teilchen im Zustand W in dem Volumen V lokalisiert ist. Der Effekt $E_V = pP_V$ mit $0 \leq p \leq 1$ kann dann als Beschreibung eines nicht-idealen Detektors interpretiert werden, der bei einer Messung an einem solchen Zustand W mit der Wahrscheinlichkeit p anspricht, denn es gilt dann $\text{tr}(E_V W) = \text{tr}(pP_V W) = p$.

Die Spektraldarstellung eines Effektoperators $E \in \mathcal{E}$ hat die Form

$$E = \sum_{k \in I} p_k P_k$$

mit einer abzählbaren Indexmenge I , einer ODI $\{P_k \in \hat{\mathcal{O}}\}_{k \in I}$ und Koeffizienten $p_k \in \mathbb{R}_0^+$ mit $\sum_{k \in I} p_k \leq 1$. Man kann eine Messung des Effekts E auch als ein “Roulette” interpretieren, bei dem eine dieser Indikatorobservablen P_k (mit der Wahrscheinlichkeit p_k) gemessen wird.

Jede konvexe Summe einer abzählbaren Menge von Effektoperatoren $\{E_k \in \mathcal{E}\}_{k \in I}$

$$E = \sum_{k \in I} p_k E_k$$

mit $p_k \in \mathbb{R}^+$ mit $\sum_{k \in I} p_k \leq 1$ definiert wieder einen Effektoperator $E \in \mathcal{E}$.

Eine *unscharfe Observable* wird mittels eines POVM (positiv operator valued measure) auf einer Ereignisalgebra (Messraum) (Ω, \mathcal{A}) ⁷ definiert,

$$E : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{E}, A \mapsto E(A)$$

das jedem Ereignis $A \in \mathcal{A}$ einen Effektoperator $E(A) \in \mathcal{E}$ zuordnet, wobei

$$E(\emptyset) = 0, E(\Omega) = 1$$

und für jede abzählbare Menge von paarweise disjunkten Borelmengen $\{A_k \in \mathcal{B}(\mathbb{R})\}_{k \in I}$

$$E\left(\bigcup_{k \in I} A_k\right) = \sum_{k \in I} E(A_k)$$

Für jeden Zustand $W \in \mathcal{S}$ definiert daher

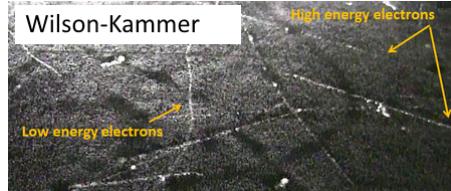
$$p_{E,W} : \mathcal{A} \rightarrow [0, 1], A \mapsto p_{E,W}(A) = \text{tr}(E(A) W)$$

ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf (Ω, \mathcal{A}) .

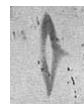
⁷meist $(\Omega, \mathcal{A}) = (\mathbb{R}^n, \mathcal{B}(\mathbb{R}^n))$

MI:

Ein Beispiel für ein POVM geben die unscharfen Ortsmessungen in einem *Spurdetektor* wie der Wilsonschen Nebelkammer. Damit können räumliche Spuren einzelner geladener Teilchen beobachtet werden. Bis heute sind solche Spurdetektoren (tracking chamber) unterschiedlicher Bauart (Nebel-, Blasen-, Funken-, Draht-, Drift-, ..., -kammer) eine der wichtigsten Beobachtungsquellen der Elementarteilchenphysik.



Die Nebelkammer kann als ein Detektor betrachtet werden, der nur manchmal - durch die zufälligen Kollisionen eines Teilchens mit den Molekülen in der Kammer - anspricht und eine Reihe von zufällig gemessenen Teilchenorten mit begrenzter Auflösung/Genauigkeit als Nebeltröpfchen anzeigt, die dann zur *unscharfen* Bestimmung der Teilchenbahn benutzt werden. Die Krümmung der Bahn in einem äußeren Magnetfeld gibt dabei Auskunft über den Impulsbetrag. Ein weiteres Beispiel für ein POVM liefert das Stern-Gerlach-Experiment (s.o.), in dem die beiden Silberstreifen nicht vollständig getrennt sind, sondern sich am Rand lippenartig verbinden, was bedeutet, dass nicht bei jedem Silberatom eine Spinmessung durchgeführt wird - manche Silberatome des Teilchenstrahls bewegen sich außerhalb des "idealen" Bereichs.



"Scharfe" Observablen, die durch PVMs bzw. selbstadjungierte Operatoren repräsentiert werden, basieren auf theoretischen Idealisierungen von Messungen, die nicht in allen Fällen möglich sind. Beim Stern-Gerlach-Experiment ist diese Idealisierung möglich, auch wenn natürlich jedes tatsächliche Experiment mit Ungenauigkeiten behaftet ist. Die "unscharfe" Messung von Teilchenbahnen in einem Spurdetektor kann dagegen nicht in dieser Weise idealisiert werden: Heisenbergs Unschärferelation verbietet die gemeinsame "scharfe" Messung von Ort und Impuls (vgl. Busch et al., 1995). "Scharfe" Ortsmessungen stören den Teilchenimpuls, sodass bei wiederholten idealen Ortsmessungen als Teilchenstrahl nur eine zufällige Zickzackbewegung in Erscheinung treten würde.

G. Ludwig hat einen axiomatischen Aufbau der QM formuliert, der von der Beschreibung physikalischer Experimente mit ungenauen Präparierungen und unscharfen Messungen ausgeht, die schließlich mittels statistischer Operatoren und Effektoroperatoren im Hilbertraum dargestellt werden (vgl. Ludwig [1983, 1985a,b, 1990]), wobei die Idealisierung durch konventionelle Observablen deutlich gemacht wird.

Ähnlich wie bei den gewöhnlichen Observablen werden oftmals diskrete POVMs verwendet, die durch eine abzählbare Menge von Effekten $\{E_k \in \mathcal{E}\}_{k \in I}$ (bei de Muynck [2002] als NODI, non-orthogonal decomposition of identity) definiert werden, für die gilt

$$\sum_{k \in I} E_k = 1$$

Mit jeder Funktion $f : I \rightarrow \mathcal{A}$ kann dann ein diskretes POVM definiert werden durch

$$E : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{E}(\mathcal{H}), A \mapsto E(A) = \sum_{k \in f^{-1}(A)} E_k$$

Ein selbstadjungierter Operator ergibt sich in dem Spezialfall, wenn $(\Omega, \mathcal{A}) = (\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$ und alle E_k Projektionsoperatoren sind, sodass E daher ein PVM bzw. $\{E_k \in \mathcal{E}\}_{k \in I}$ ein ODI (orthogonal decomposition of identity) darstellt.

1.2 Funktionen, Kommutativität, gemeinsamer Wahrscheinlichkeitsraum und gemeinsame Messbarkeit

Jede borelmessbare Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definiert einerseits auf dem Wahrscheinlichkeitsraum $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}), p_{X,W})$ der Observablen $X \in \mathcal{O}$ im Zustand $W \in \mathcal{S}$ eine Zufallsvariable \tilde{f} , andererseits gleichzeitig auf dem Hilbertraum \mathcal{H} durch die entsprechende Operatorfunktion⁸ eine weitere Observable

⁸Diese einfache Möglichkeit, Funktionen von Observablen als Operatorfunktion zu behandeln, zeichnet die scharfen Observablen aus.

$f(X) \in \mathcal{O}$. Für den Erwartungswert von $f(X)$ im Zustand W gilt dann

$$\langle \tilde{f} \rangle_{p_{X,W}} = \int f(x) dp_{X,W} = \text{tr}(f(X) W) = \langle f(X) \rangle_W$$

Trivialerweise gibt es daher für die Observablen X und $f(X)$ einen gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsraum, in dem beide als Zufallsvariablen betrachtet werden können. Für das Wahrscheinlichkeitsmaß $p_{f(X),W}$ gilt für alle $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$

$$p_{f(X),W}(A) = p_{X,W}(f^{-1}(A))$$

und entsprechend für das zugehörige PVM

$$P_{f(X)}(A) = P_X(f^{-1}(A))$$

Gibt es für zwei Observablen X, Y eine dritte Observable Z und borelmessbare Funktionen f, g sodass $X = f(Z)$ und $Y = g(Z)$, dann gibt es für jeden Zustand auch einen gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsraum. Für paarweise kommutierende Observablen ist dies immer der Fall.

Der Grund wird durch ein Theorem von v. Neumann aufgezeigt (vgl. v. Neumann [1932], Varadarajan [1968]): Zu jeder Familie von selbstadjungierten Operatoren $\{X_k \in \mathcal{D}(\mathcal{H})\}_{k \in I}$, die paarweise kommutieren, gibt es einen selbstadjungierten Operator $X \in \mathcal{D}(\mathcal{H})$ und eine Familie von borelmessbaren reellen Funktionen $\{f_k \in \mathbb{R}^{\mathbb{R}}\}_{k \in I}$, sodass für alle $k \in I$ gilt $X_k = f_k(X)$. Für alle Zustände $W \in \mathcal{S}$ ist dann $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}), p_{X,W})$ der gemeinsame Wahrscheinlichkeitsraum, in dem die Observablen X_k durch die Zufallsvariablen \tilde{f}_k repräsentiert werden.

MI:

Wird im Experiment bei einer Messung von X der Wert $x_M \in \mathbb{R}$ gemessen, so wird implizit gleichzeitig für die Observable $f(X)$ der Wert $f(x_M)$ gemessen. Sind also zwei Observablen X, Y Funktionen einer dritten Observable Z mit $X = f(Z)$ und $Y = g(Z)$, so können sie prinzipiell gemeinsam in einem Einzelexperiment gemessen werden: Jede Messung von Z ist gleichzeitig auch eine Messung von X und Y .

Aufgrund des zitierten Theorems von v. Neumann gilt daher: *Kommutierende Observablen können in einem Einzelexperiment gemeinsam gemessen werden.*

Für nicht-kommutierende Observablen kann i. A. kein gemeinsamer Wahrscheinlichkeitsraum angegeben werden. Dies ist ein fundamentaler Unterschied zur klassischen statistischen Mechanik, in der alle Observablen Funktionen auf dem Phasenraum sind und somit jeder Zustand einen gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsraum für alle Observablen konstituiert.

In der QM gibt es schon das Problem, dass Funktionen nicht kommutierender Observablen, d.h. selbstadjungierter Operatoren, i. A. keinen selbstadjungierten Operator, d.h. keine Observable, ergeben (z.B. $f(X, Y) = XY$). Betrachtet man nur Linearkombinationen, so sind diese, zumindest für beschränkte Observablen, wohldefiniert. Für reelle Zufallsvariablen $X, Y : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ auf einem Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{A}, p) , ist jede reelle Linearkombination $aX + bY$ mit $a, b \in \mathbb{R}$ ebenfalls eine Zufallsvariable, deren Erwartungswert die entsprechende Linearkombination der Erwartungswerte ist

$$\langle aX + bY \rangle = a\langle X \rangle + b\langle Y \rangle$$

Zwar gilt letzteres auch für jeden Zustand $W \in \mathcal{S}$ und alle beschränkten Observablen $X, Y \in \widehat{\mathcal{O}}$, denn es gilt dann

$$\text{tr}((aX + bY)W) = a \text{tr}(XW) + b \text{tr}(YW)$$

aber ein gemeinsamer Wahrscheinlichkeitsraum ist trotzdem nicht immer möglich. Wenn X, Y nicht kommutieren, gibt es Zustände, in denen die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Linearkombinationen der Observablen nicht denen von Zufallsvariablen entsprechen. Varadarajan [1962] und Nelson [1967] haben gezeigt, dass ein gemeinsamer Wahrscheinlichkeitsraum für Observablen $X, Y \in \widehat{\mathcal{O}}$ und alle ihre reellen Linearkombinationen $aX + bY$ mit $a, b \in \mathbb{R}$ nur dann für alle Zustände $W \in \mathcal{S}$ angegeben werden kann, wenn X und Y kommutieren.

MI:

Nicht-kommutierende Observablen können in einem Einzelexperiment i.A. nicht gemeinsam gemessen werden.

Diese Aussage bezieht sich nur auf ideale, exakte Messungen. *Unschärfe* gemeinsame Messungen sind möglich, wie die quasi-klassischen Teilchenbahnen in einem Spurdetektor zeigen, bei denen die nicht-kommutierenden Observablen Ort und Impuls des Teilchen näherungsweise gemessen werden; Heisenbergs Unschärferelation [1927] gibt aber Grenzen für diese Messungen vor.

Die Nichtexistenz eines gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsraumes kann als theoretisches Argument gegen die gleichzeitige exakte Messbarkeit verstanden werden: Denn selbst, wenn es möglich ist, in einem Einzelexperiment gleichzeitig Messwerte für nicht-kommutierende Observablen zu gewinnen, muss es Zustände geben, in denen die in Versuchsreihen gewonnenen relativen Häufigkeiten für die Messwerte der Observablen und ihrer Linearkombinationen nicht die von der QM vorgegebenen Wahrscheinlichkeitsmaße approximieren, da relative Häufigkeiten im Experiment immer ein gemeinsames Wahrscheinlichkeitsmaß auf dem Produktraum der Messergebnisse konstituieren.

Ein gemeinsamer Wahrscheinlichkeitsraum ist die Voraussetzung dafür, dass man wahrscheinlichkeitstheoretische Begriffe wie bedingte Wahrscheinlichkeit, Korrelation, Kovarianz, ... anwenden kann.

Gemeinsam messbare Effekte und POVMs

Dass für eine gemeinsame Messung für jeden Zustand ein gemeinsamer Wahrscheinlichkeitsraum gegeben sein muss, liefert auch die Definition der gemeinsamen Messbarkeit von unscharfen Observablen. Im Gegensatz zu den Projektoren eines PVMs müssen die Effekte, die zu einem POVM $E : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{E}(\mathcal{H})$ gehören, *nicht* paarweise kommutieren. Man bezeichnet eine Menge von Effekten $\{E_k\}_{k \in I}$ als *koexistent* bzw. *gemeinsam messbar*, wenn ein Ereignisraum (Ω, \mathcal{A}) und ein POVM $E : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{E}(\mathcal{H})$ existiert, zu dem diese Effekte als Bild gehören $\{E_k\}_{k \in I} \subseteq E(\mathcal{A})$. Damit konstituiert jeder Zustand $W \in \mathcal{S}$ einen gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathcal{A}, p_{E,W})$.

Kommutieren alle Effekte eines POVM $E : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{E}(\mathcal{H})$, $B \mapsto E(B)$ paarweise, so gibt es einen selbstadjungierten Operator $X \in \mathcal{O}(\mathcal{H})$, sodass alle Effekte mit borelmessbaren Funktionen $f_B : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_0^+$ als Funktionen dieses Operators dargestellt werden können $E(B) = f_B(X)$. Man bezeichnet E dann als *Verschmierung* (smearing) des Operators X .

Zwei POVMs E, F sind gemeinsam messbar, wenn ein POVM G existiert, das die beiden POVMs als Marginalien enthält. Für NODIs $\{E_j \in \mathcal{E}(\mathcal{H})\}_j, \{F_k \in \mathcal{E}(\mathcal{H})\}_k$ bedeutet das: es gibt ein NODI $\{G_{j,k} \in \mathcal{E}(\mathcal{H})\}_{j,k}$ mit $E_j = \sum_k G_{j,k}$ und $F_k = \sum_j G_{j,k}$. Für jeden Zustand definiert dann G einen gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsraum, in dem E, F Marginalverteilungen definieren.

1.3 Mischungen und reine Zustände

Für eine abzählbare Menge von Dichteoperatoren $\{W_k \in \mathcal{S}\}_{k \in I}$ ist jede konvexe Summe⁹

$$W = \sum_{k \in I} p_k W_k$$

mit $p_k \in \mathbb{R}^+$ und $\sum_{k \in I} p_k = 1$ ebenfalls ein Dichteoperator $W \in \mathcal{S}$. Man bezeichnet den Zustand W auch als *Mischung* aus den *Komponenten* W_k mit den *statistischen Gewichten* p_k . Befindet sich das System im Zustand W , so gilt für alle Observablen $X \in \mathcal{O}$

$$\langle X \rangle_W = \text{tr}(X W) = \sum_{k \in I} p_k \text{tr}(X W_k) = \sum_{k \in I} p_k \langle X \rangle_{W_k}$$

Ein Zustand $W \in \mathcal{S}$ ist *rein*, wenn er nicht als Mischung verschiedener Komponenten darstellbar ist. Ein Zustand $W \in \mathcal{S}$ ist genau dann rein, wenn

$$W^2 = W$$

⁹Für abzählbar unendliche Mengen konvergiert die Summe bzgl. der Operatornorm in $\mathcal{L}(\mathcal{H})$.

Dies ist genau dann der Fall, wenn W ein Projektionsoperator auf einen eindimensionalen Teilraum von \mathcal{H} ist. Mit jedem Einheitsvektor ψ ($\|\psi\| = 1$) aus diesem Teilraum (d.h. $W\psi = \psi$ und $W = P_{[\psi]}$) gilt für alle Observablen $X \in \mathcal{O}$

$$\text{tr}(X W) = \langle \psi, X\psi \rangle$$

Man bezeichnet ψ als *Zustandsvektor*.

Viele Darstellungen der QM verzichten auf Mischungen und behandeln ausschließlich reine Zustände, die jeweils durch einen Zustandsvektor $\psi \in \mathcal{H}$ beschrieben werden. Der Erwartungswert einer Observablen $X \in \mathcal{O}$ wird dann mit Hilfe des Skalarprodukts berechnet

$$\langle X \rangle_\psi = \langle \psi, X\psi \rangle$$

Jeder statistische Operator $W \in \mathcal{S}$ kann als Mischung von reinen Zuständen dargestellt werden, d.h. es gibt eine abzählbare Menge von Vektoren $\{\psi_k \in \mathcal{H}\}_{k \in I}$, sodass

$$W = \sum_{k \in I} p_k P_{[\psi_k]}$$

wobei alle $p_k > 0$, $\sum_{k \in I} p_k = 1$ und $P_{[\psi_k]}$ der Projektionsoperator auf den vom Zustandsvektor ψ_k aufgespannten eindimensionalen Teilraum $[\psi_k]$ sind. Dann gilt

$$\langle X \rangle_W = \text{tr}(X W) = \sum_{k \in I} p_k \langle \psi_k, X\psi_k \rangle = \sum_{k \in I} p_k \langle X \rangle_\psi$$

Die Vektoren $\{\psi_k \in \mathcal{H}\}_{k \in I}$ müssen dabei nicht paarweise orthogonal sein. Dabei ist jedoch zu beachten, dass die Komponenten $P_{[\psi_k]}$ durch die Mischung W i.A. *nicht eindeutig* bestimmt sind und verschiedene reine Zustände die gleiche Mischung ergeben können.

Sind z.B. $\psi, \varphi \in \mathcal{H}$ zwei orthogonale Zustandsvektoren mit $\langle \psi, \varphi \rangle = 0$, so ergibt die Mischung $\frac{1}{2}P_{[\psi]} + \frac{1}{2}P_{[\varphi]}$ exakt den gleichen statistischen Operator wie die Mischung $\frac{1}{2}P_{[\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi+\varphi)]} + \frac{1}{2}P_{[\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi-\varphi)]}$ der orthogonalen reinen Zustände $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi + \varphi)$ und $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi - \varphi)$. Das gleiche gilt für $\frac{1}{4}P_{[\psi]} + \frac{1}{4}P_{[\varphi]} + \frac{1}{4}P_{[\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi+\varphi)]} + \frac{1}{4}P_{[\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi-\varphi)]}$.

MI:

Im Experiment hängt die Präparierung des Zustands i.A. von gewissen Kontrollparametern (z.B. Entfernung, Beschleunigerspannung, Temperatur) ab, die man "zufällig" variiieren kann, um auf diese Weise Mischungen zu präparieren. Da sich gewisse zufällige Schwankungen dieser Parameter in einer statistischen Versuchsreihe nicht vermeiden lassen, ist aber davon auszugehen, dass in der experimentellen Realität immer solche Mischungen präpariert werden und reine Zustände eher idealisierte Grenzfälle darstellen.

Ist der Zustand des Systems durch eine Mischung $W = \sum_{k \in I} p_k P_{[\psi_k]}$ aus reinen Zuständen ψ_1, ψ_2, \dots gegeben, so wird das manchmal so interpretiert, dass sich das System (in jedem Einzelexperiment) tatsächlich (mit der Wahrscheinlichkeit p_k) in *einem* der reinen Zustände ψ_k befindet. Nun gibt es sicher Szenarien, in denen dies der Fall ist: z.B. wenn die Mischung in einer Apparatur aus reinen Zuständen erzeugt wird, bei der ein Experimentator durch Nachmessen der Kontrollparameter den Zustand genau bestimmen kann.

I. A. können aber solche Vorstellungen aufgrund der Uneindeutigkeit der Komponentenzerlegung zu Widersprüchen führen. Ballentine [1998] diskutiert (S. 239 ff.) beispielsweise den Fall eines Elektronenbeschleunigers: Der gleiche Zustand eines präparierten Elektrons kann dort sowohl als Mischung von Wellenpaketen als auch als Mischung ebener Wellen dargestellt werden.

1.4 Entropie des Zustands

Mischungen entsprechen klassischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen reiner Zustände, wie man auch anhand der von v. Neumann eingeführten *Entropie* des Zustands $W \in \mathcal{S}$

$$S : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}_0^+, W \mapsto S(W) = -k_B \text{tr}(W \log(W))$$

sehen kann, wobei k_B die *Boltzmannkonstante* kennzeichnet. Schreibt man den Zustand W als Mischung von paarweise orthogonalen reinen Zuständen $W = \sum_k p_k P_{[\psi_k]}$, so gilt

$$S(W) = -k_B \sum_k p_k \log(p_k)$$

In einem reinen Zustand hat die Entropie den Wert 0. Man kann daher reine Zustände als Zustände minimaler ‘‘Unbestimmtheit’’ auffassen. Für eine Mischung aus n orthogonalen reinen Zuständen ist die Entropie maximal, wenn alle das gleiche statistische Gewicht $p_k = \frac{1}{n}$ haben; der Wert Entropie ist dann $k_B \log(n)$.

MI:

Die genaue Kontrolle der Apparatur zur Präparierung des Systems dient der Minimierung der Entropie des Zustandes. Im Idealfall ist das Präparierverfahren so exakt, dass ein reiner Zustand mit der Entropie 0 präpariert wird.

In der Quanteninformatik verwendet man üblicherweise eine Definition, die sich um einen konstanten Faktor unterscheidet

$$\tilde{S}(W) = -\text{tr}(W \log_2(W))$$

Für n Qubits ($\mathcal{H} = \mathbb{C}^{2^n}$) ist die maximale Entropie dann n , was gerade einer *Information* von n Bit entspricht.

1.5 Streufreiheit und Eigenzustände

Ist der Erwartungswert $\langle A \rangle_W = a$ einer Observablen $A \in \mathcal{O}$ in einem Zustand $W \in \mathcal{S}$ *streuungsfrei*, d.h. gilt für die Wurzel des Erwartungswertes der Varianz $V = (A - a1)^2 \in \mathcal{O}$

$$\sigma_A = \sqrt{\langle V \rangle_W} = \sqrt{\langle (A - a1)^2 \rangle_W} = 0$$

so bezeichnet man W als *Eigenzustand*¹⁰ der Observablen A zum *Eigenwert* a .

Für jede borelmessbare Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ist ein Eigenzustand $W \in \mathcal{S}$ der Observablen $A \in \mathcal{O}$ mit dem Eigenwert a auch ein Eigenzustand der Observablen $f(A)$ zum Eigenwert $f(a)$.

MI:

Im Experiment bedeutet die Präparierung eines solchen Eigenzustands W in einer Versuchsreihe, dass bei jeder Messung der Observablen A mit Sicherheit der Wert a (und damit auch für jede Funktion $f(A)$ der Wert $f(a)$) gemessen wird.

Dies kann man so interpretieren, dass die *Observable* A in diesem Fall jedes mal auch ohne Messung den Wert a hat (vgl. Dirac, 1958, S.46), was dem üblichen Vorgehen in Experimenten entspricht: z.B. justiert man einen Teilchenstrahl mit Kontrollmessungen, um Teilchen mit einem bestimmten Impuls zu präparieren. Nach dieser Vorbereitung, wird der Teilchenstrahl verwendet, um Streuexperimente durchzuführen. Dabei wird angenommen, dass alle präparierten Teilchen den festgelegten Impuls haben (vgl. Compton-Simon-Experiment, s.u.).

Ein Zustand $W \in \mathcal{S}$ ist genau dann Eigenzustand der Observablen $A \in \mathcal{O}$ zum Eigenwert $a \in \mathbb{R}$, wenn gilt

$$AW = aW$$

Denn aus $AW = aW$ folgt $\text{tr}(AW) = a\text{tr}(W) = a$ und $\text{tr}((A - a1)^2 W) = \text{tr}((A - a)(AW - aW)) = 0$. Für die umgekehrte Richtung betrachtet man W als Mischung reiner Zustände $W = \sum_k p_k P_{[\psi_k]}$. Ist der Erwartungswert a von A streuungsfrei, so muss er für jede Komponente $P_{[\psi_k]}$ der Mischung streuungsfrei sein. Aus $0 = \langle \psi_k, (A - a1)^2 \psi_k \rangle$ folgt dann $\langle (A - a1)\psi_k, (A - a1)\psi_k \rangle = 0$ und $(A - a1)\psi_k = 0$. Alle ψ_k sind also Eigenvektoren von A zum Eigenwert a , woraus sich für die Mischung $AW = WA = aW$ ergibt.

Ist der Eigenzustand W rein, so ist der zugehörige Zustandsvektor ψ ein Eigenvektor des Operators A , d.h. $A\psi = a\psi$. Andernfalls kann der Eigenzustand W als Mischung von Eigenvektoren zum Eigenwert a dargestellt werden.

¹⁰Oftmals wird diese Definition auf reine Zustände eingeschränkt. Wir folgen Weinberg [2014].

1.6 Streuungsfreie Zustände und Unbestimmtheitsrelation

In der klassischen statistischen Mechanik sind für Punktmaße (Diracmaße) auf dem Phasenraum *alle* Observablen streuungsfrei. Im Gegensatz dazu gibt es in der Quantenmechanik keine solchen *streuungsfreien Zustände* $W \in \mathcal{S}$.

Ist $\psi \in \mathcal{H}$ ein reiner Zustand des Systems, so stellt der Projektionsoperator $P_{[\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi+\varphi)]}$ auf einen Vektor $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi + \varphi)$ mit einem zu ψ orthogonalen Einheitsvektor $\varphi \in \mathcal{H}$ eine Observable dar, deren Streuung im Zustand ψ nicht verschwindet. Eine Mischung wiederum kann bzgl. einer Observablen nur dann streuungsfrei sein, wenn alle reinen Zustände, die als Komponenten der Mischung auftreten, streuungsfrei sind.

Ein weiteres Beispiel liefert die *Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation*¹¹ [Heisenberg, 1927], die für die Streuungen σ_X, σ_P von Ort und Impuls $X, P \in \mathcal{O}$ eines Teilchens in einem beliebigen Zustand $W \in \mathcal{S}$ die folgende Beziehung angibt

$$\sigma_X \sigma_P \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.3)$$

wobei $\sigma_X = \sqrt{\langle (X - x_1)^2 \rangle_W}, \sigma_P = \sqrt{\langle (P - p_1)^2 \rangle_W}$ und $\hbar = 1,05 \dots \times 10^{-34} \text{ Js}$ (das Plancksche Wirkungsquantum dividiert durch 2π). Je geringer die Streuung des Ortes für einen Zustand $W \in \mathcal{S}$ ist, desto größer ist also die Streuung des Impulses im gleichen Zustand und umgekehrt¹². Dies ist nur für nicht-kommutierende Observablen möglich (vgl. Abs. 1.2).

MI:

In dieser Form macht die Unbestimmtheitsrelation keine Aussage über Messgenauigkeiten, sondern über die “Schärfe” der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Messergebnisse. Im Experiment können an einem präparierten Zustand W (z.B. an einem Teilchenbeschleuniger) in zwei Versuchsreihen einerseits wiederholt der Ort X , andererseits wiederholt der Impuls P eines Teilchens beliebig genau gemessen werden. Die Unbestimmtheitsrelation macht dann lediglich eine Aussage über die Streuungen, deren Werte in der Versuchsreihe durch die mittlere quadratische Abweichung der Messwerte vom Mittelwert ermittelt werden können.

Es gibt aber gewisse Zusammenhänge mit den bei einer gemeinsamen Messung in einem Einzelexperiment erreichbaren Messgenauigkeiten δ_X, δ_P , die von Heisenberg [1927] ebenfalls behandelt und in einer entsprechenden *Unschärferelation* $\delta_X \delta_P \geq \text{const} \cdot \hbar$ zum Ausdruck gebracht wurden. Diese prinzipielle Einschränkung der Messgenauigkeit wurde dort von Heisenberg als Grund des quantenmechanischen Indeterminismus dargestellt (vgl. auch v. Neumann, 1932) und nur exemplarisch aufgezeigt. Heute wird diese Relation aus der Theorie der unscharfen Observablen gefolgt (vgl. Busch et al., 2007). Das Beispiel der Wilsonschen Nebelkammer (bzw. aller Spurdetektoren) wurde schon angeführt. Diese erlaubt die gemeinsame unscharfe Messung von Ort und Impuls, wobei die Unschärferelation die Messgenauigkeit von Orts- und Impulsmessung begrenzt.

2 Dynamik: Transformationen, Hamiltonoperator und Bewegungsgleichungen

Ist $\mathbb{T} \subseteq \mathbb{R}$ ein Zeitintervall oder eine Menge von diskreten Zeitpunkten, an denen die Entwicklung des Systems betrachtet wird, so wird einem quantenmechanischen System für jeden Zeitpunkt $t \in \mathbb{T}$ ein Zustand $W(t) \in \mathcal{S}$ zugeschrieben

$$W : \mathbb{T} \rightarrow \mathcal{S}, t \mapsto W(t)$$

¹¹Heisenberg [1930] spricht von Unbestimmtheitsrelation, Heisenberg [1927], Pauli [1933] auch von Unsicherheitsrelation.

¹²Aus dieser Relation folgt auch, dass es keine echten Eigenzustände für den Ort bzw. den Impuls geben kann.

Für ein *geschlossenes*¹³ System (bzgl. *offener* Systeme s. Abs. 3.4) ist die Funktion $W(t)$ durch einen Anfangszustand $W(0)$ und eine Menge unitärer Transformationen $\{U_{t,t'} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})\}_{t,t' \in \mathbb{T}}$ des Hilbertraums \mathcal{H} definiert, wobei für alle Zeitpunkte $t, t', t'' \in \mathbb{T}$ gilt

$$W(t') = U_{t,t'} W(t) U_{t,t'}^\dagger \quad (2.1)$$

$$U_{t,t'} U_{t',t''} = U_{t,t''}$$

$$U_{t,t} = 1$$

$$U_{t',t} = U_{t,t'}^{-1} = U_{t,t'}^\dagger$$

Ein geschlossenes System ist *isoliert* (*abgeschlossen*), wenn mit $\mathbb{T} = \mathbb{R}$ die zeitliche Entwicklung nur von der Zeitdifferenz und nicht vom absoluten Zeitpunkt abhängt, d.h. es gilt für alle $s, t, t' \in \mathbb{R}$

$$U_{t,t+s} = U_{t',t'+s} = U_{0,s}$$

und diese Abhängigkeit in der Normtopologie stetig ist

$$\lim_{s \rightarrow 0} \|U_{0,t+s} - U_{0,t}\| = 0$$

Diese Transformationen bilden dann eine kommutative Gruppe $\{U_s \in \mathcal{L}(\mathcal{H})\}_{s \in \mathbb{R}}$, bei der für alle $s, t \in \mathbb{R}$ gilt

$$U_0 = 1$$

$$U_s U_t = U_t U_s = U_{s+t}$$

$$U_{-t} = U_t^\dagger = U_t^{-1}$$

2.1 Kommutativität und Hamiltonoperator

Für ein isoliertes System folgt dann¹⁴, dass es einen selbstadjungierten Operator $H \in \mathcal{O}(\mathcal{H})$ gibt, mit dem für alle $t \in \mathbb{R}$ ¹⁵ gilt

$$U_t = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} t H\right)$$

Man bezeichnet H als *Hamiltonoperator*.

Für geschlossene Systeme sind im allgemeinen Fall die Transformationen $\{U_{t,t'} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})\}_{t,t' \in \mathbb{T}}$ nicht kommutativ. Man kann dennoch für kompakte \mathbb{T} bei entsprechenden Stetigkeitsannahmen für kleine Zeitintervalle Δt schreiben

$$U_{t,t+\Delta t} \approx \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \Delta t H_t\right) \quad (2.2)$$

mit zeitabhängigen Hamiltonoperatoren H_t , wobei i.A. $[H_t, H_{t'}] \neq 0$ für $t \neq t'$ gilt.

Häufig betrachtet man Systeme, deren Hamiltonoperator zwar insgesamt zeitabhängig, aber für gewisse Zeitintervalle konstant ist. In der Quanteninformatik behandelt man diskrete Folgen von (i.A. nicht-kommunitierenden) unitären Transformationen eines n -Qubit-Systems ($\mathcal{H} = \mathbb{C}^{2^n}$) als "Maschinenprogramme" eines Quantencomputers, wobei jede unitäre Transformation für eine einzelne Operation steht.

¹³Wir folgen in der Terminologie bzgl. *offen* (open), *geschlossen* (closed) und *isoliert* (isolated) Breuer and Petruccione [2002].

¹⁴nach dem Satz von Stone

¹⁵In Gegensatz zu den folgenden Differentialgleichungen ist die Formulierung der Dynamik mittels unitärer Transformationen insofern mathematisch unproblematisch, dass die zugehörigen unitären Transformationen auch für unbeschränkte Hamiltonoperatoren im ganzen Hilbertraum definiert sind.

MI:

Die Messung der Zeitabhängigkeit der Zustände erfordert die Ermittlung der Startzeit der Einzelexperimente und der Zeit, zu der eine Messung erfolgt.

Bei Teilchenbeschleunigern kann z.B. zum Zeitpunkt t ein Verschluss geöffnet und an dem Teilchenstrahl in (entsprechender Entfernung) zum Zeitpunkt $t < t'$ eine Messung vorgenommen werden. In Drahtkammerdetektoren ergibt sich eine individuelle Teilchenspur durch elektrische Impulse, die an den Drähten automatisiert gemessen werden und dadurch die zeitliche Festlegung der einzelnen Ortsmessungen an einer Teilchenspur ermöglichen. Auf diese Weise kann auch die Geschwindigkeit der Teilchen näherungsweise ermittelt werden.

2.2 Determinismus und Reversibilität

Der zeitliche Verlauf der Zustände eines geschlossenen Systems ist *deterministisch und reversibel*¹⁶. Dies folgt aus der Bijektivität der unitären Transformationen in (2.1).

2.3 v. Neumannsche Bewegungsgleichung

Durch Differenzieren von $W(t) = U_{0,t}W(0)U_{0,t}^\dagger$ erhält man, wie in (2.2) angedeutet, die *v. Neumannschen Bewegungsgleichung*

$$\frac{d}{dt} W(t) = \frac{i}{\hbar}(W(t)H_t - H_t W(t)) = \frac{i}{\hbar} [W(t), H_t]$$

wobei H_t ein zeitabhängiger Hamiltonoperator ist. Bei isolierten Systemen ist $H_t = H$ zeitlich konstant.

Diese Gleichung entspricht der Liouville-Gleichung der klassischen statistischen Mechanik und wird deshalb auch manchmal als v. Neumann-Liouville-Gleichung bezeichnet.

2.4 Reine Zustände und abstrakte Schrödinger-Gleichung

Ist das System zum Zeitpunkt $t = 0$ in einem reinen Zustand $W(0) = W(0)^2$, so ist der Zustand $W(t) = U_{0,t}W(0)U_{0,t}^\dagger = U_{0,t}W(0)U_{0,t}^\dagger U_{0,t}W(0)U_{0,t}^\dagger = W(t)^2$ für alle Zeiten t rein und man kann die zeitliche Entwicklung des Zustands auch mittels Zustandsvektoren beschreiben

$$\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H}, t \mapsto \psi(t) = U_{0,t}\psi(0)$$

Durch Differenzieren erhält man dann die *abstrakte Schrödinger-Gleichung*

$$\frac{d}{dt}\psi(t) = -\frac{i}{\hbar}H_t\psi(t)$$

Da es sich um eine lineare Differentialgleichung handelt, ist mit den Lösungen $\psi_1(t), \psi_2(t)$ auch jede Linearkombination $a\psi_1(t) + b\psi_2(t)$ mit $a, b \in \mathbb{C}$ eine Lösung, wobei die Bedingung $|a|^2 + |b|^2 = 1$ für die Normierung sorgt.

Ist $W(0)$ eine Mischung aus den reinen Zuständen ψ_k , d.h. $W(0) = \sum_k p_k P_{[\psi_k]}$, so gilt für alle $t \in \mathbb{R}$

$$W(t) = U_{0,t}W(0)U_{0,t}^\dagger = U_{0,t} \left(\sum_k p_k P_{[\psi_k]} \right) U_{0,t}^\dagger = \sum_k p_k U_{0,t} P_{[\psi_k]} U_{0,t}^\dagger = \sum_k p_k P_{[U_{0,t}\psi_k]}$$

¹⁶Wir verstehen "reversibel" hier im logischen Sinn, d.h. zu jedem Endzustand gehört genau ein Anfangszustand.

2.5 Entropie- und Energieerhaltung, Erhaltungsgrößen, stationäre Zustände

Da unitäre Transformationen Mischungen von reinen Zuständen in Mischungen von reinen Zuständen überführen, ohne dass sich die statistischen Gewichte ändern, bleibt die Entropie für geschlossene Systeme zeitlich konstant. Es gilt für alle $t \in \mathbb{R}$

$$S(W(t)) = \sum_k p_k P_{[U_{0,t}\psi_k]} = -k_B \sum_k p_k \log(p_k) = S(W(0))$$

Betrachtet man die Zeitabhängigkeit des Erwartungswertes einer Observablen $X \in \mathcal{O}$ bei einem isolierten System

$$\langle X \rangle_t = \text{tr}(X W(t)) = \text{tr}(X U_t W(0) U_t^\dagger) = \text{tr}(X \exp(-\frac{i}{\hbar}tH) W(0) \exp(\frac{i}{\hbar}tH))$$

so erkennt man, dass, wenn X mit dem Hamiltonoperator kommutiert, d.h. $[H, X] = 0$, für alle Zeitpunkte $t \in \mathbb{R}$ gilt

$$\langle X \rangle_t = \text{tr}(\exp(\frac{i}{\hbar}tH) \exp(-\frac{i}{\hbar}tH) X W(0)) = \text{tr}(X W(0)) = \langle X \rangle_0.$$

X ist dann eine Erhaltungsgröße. Dies gilt auch für alle Funktionen $f(X)$, da dann $[H, f(X)] = 0$. Insbesondere bleibt der Erwartungswert der *Energie* eines isolierten Systems, die durch den zeitlich konstanten Hamiltonoperator H dargestellt wird, erhalten.

Hat dieser Hamiltonoperator Eigenwerte, so ergeben die zugehörigen reinen Eigenzustände

$$H\varphi_n = e_n \varphi_n$$

stationäre Lösungen der Schrödingergleichung

$$\psi_n(t) = \exp(-\frac{i}{\hbar}e_n t) \varphi_n$$

in denen die Energie streuungsfrei den Wert e_n und alle Observablen $X \in \mathcal{O}$ zeitlich konstante Erwartungswerte haben

$$\langle \psi_n(t) | X \psi_n(t) \rangle = \langle \varphi_n | X \varphi_n \rangle = \langle \psi_n(0) | X \psi_n(0) \rangle$$

Letzteres gilt natürlich auch für alle Mischungen dieser Zustände, weshalb diese zur Beschreibung von thermodynamischen *Gleichgewichtszuständen* verwendet werden z.B. für ein *kanonisches Ensemble* (System im Gleichgewicht mit einem Wärmebad der absoluten Temperatur T)

$$W = \sum_n p_n P_{[\psi_n]} = \frac{1}{Z_T} \sum_n \exp(-\frac{e_n}{k_B T}) P_{[\psi_n]} = \frac{1}{Z_T} \exp(-\frac{H}{k_B T})$$

wobei k_B die Boltzmann-Konstante darstellt und über alle Basisvektoren ψ_n einer Orthonormalbasis von Eigenvektoren von H summiert wird. Der Normierungsfaktor Z_T wird als *Zustandssumme* bezeichnet.

Bei der Untersuchung physikalischer Systeme spielt die Ermittlung des Energiespektrums $\sigma(H)$ sowie der zugehörigen Eigenvektoren eine zentrale Rolle. Historisch war das Spektrum des Hamiltonoperators des Wasserstoffatoms von entscheidender Bedeutung, das die Energieniveaus des *Bohrschen Atommodells* wiedergibt (vgl. Schrödinger, 1926a). Das Spektrum des Hamiltonoperators ist in der Regel von unten beschränkt: $\exists e_0 \in \mathbb{R} : \forall e \in \sigma(H) : e_0 \leq e$. Ist die untere Grenze e_0 durch einen Eigenwert gegeben, so bezeichnet man jeden zugehörigen stationären Zustand (minimaler Energie) ψ_0 als *Grundzustand* des Systems, alle anderen Zustände als *angeregt*. Zustandsübergänge zwischen den stationären Zuständen finden nur bei äußerer Wechselwirkung z.B. mit dem elektromagnetischen Feld statt.

2.6 Schrödingerbild, Heisenbergbild, Heisenbergsche Bewegungsgleichung

Bisher wurde ausschließlich das *Schrödingerbild* behandelt, in dem die Zustände zeitabhängig, die Observablen dagegen konstant sind. Betrachtet man die Zeitabhängigkeit der Erwartungswerte

$$\langle X \rangle_t = \text{tr}(X W(t)) = \text{tr}(X U_{t,0} W(0) U_{t,0}^\dagger)$$

so kann man durch eine kleine Umformung zum *Heisenbergbild* gelangen

$$\langle X \rangle_t = \text{tr}(U_{t,0}^\dagger X U_{t,0} W(0)) = \text{tr}(X_H(t) W_H)$$

in dem alle Observablen als zeitabhängig

$$X_H : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{O}, t \mapsto X_H(t) = U_{t,0}^\dagger X U_{t,0}$$

betrachtet werden, der Zustand des Systems

$$W_H = W(0)$$

dagegen als konstant. Die Zeitabhängigkeit der Observablen wird dann durch die *Heisenbergsche Bewegungsgleichung* bestimmt

$$\frac{d}{dt} X_H(t) = \frac{i}{\hbar} [H(t), X_H(t)] + \frac{\partial}{\partial t} X_H(t) \quad (2.3)$$

wobei der letzte Term nur für explizit (d.h. auch im Schrödingerbild) zeitabhängige Operatoren (wie H_t) von Null verschieden ist.

3 Komposition: Zustände, Observablen und Dynamik der Teilsysteme

Ist ein System aus den *unterscheidbaren Teilsystemen* mit den zugeordneten Hilberträumen $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$ zusammengesetzt, so wird ihm als Hilbertraum das Tensorprodukt $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ zugeordnet, wobei die Observablen der Teilsysteme $X_A \in \mathcal{O}_A \subseteq \mathcal{O}(\mathcal{H}_A), X_B \in \mathcal{O}_B \subseteq \mathcal{O}(\mathcal{H}_B)$ in \mathcal{H} durch die tensoriellen Produktoperatoren $X_A \otimes 1, 1 \otimes X_B \in \mathcal{O} \subseteq \mathcal{O}(\mathcal{H})$ dargestellt werden.

3.1 Produktzustände, stochastische Abhängigkeit, Verschränkung

Observablen verschiedener Teilsysteme z.B. $X \otimes 1, 1 \otimes Y$ mit $X \in \mathcal{O}(\mathcal{H}_A), Y \in \mathcal{O}(\mathcal{H}_B)$ kommutieren trivialerweise. Es gibt daher für jeden Zustand $W \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ des Gesamtsystems einen gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsraum $(\mathbb{R}^2, \mathcal{B}(\mathbb{R}^2), p_{XY,W})$, in dem diese Observablen als Zufallsvariablen dargestellt werden können. Mit den PVMs $P_X : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{O}(\mathcal{H}_1), A \mapsto P_X(A)$, $P_Y : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{O}(\mathcal{H}_2), B \mapsto P_Y(B)$ ist das entsprechende Wahrscheinlichkeitsmaß definiert durch die Fortsetzung von

$$p_{XY,W} : \mathcal{B}(\mathbb{R})^2 \rightarrow [0, 1], A \times B \mapsto p_{XY,W}(A \times B) = \text{tr}(P_X(A) \otimes P_Y(B) W)$$

auf $\mathcal{B}(\mathbb{R}^2)$. Für *Produktzustände* $W_A \otimes W_B \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ mit $W_A \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A), W_B \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_B)$ gilt dabei

$$\begin{aligned} p_{XY,W_A \otimes W_B}(A \times B) &= \text{tr}((P_X(A)W_A) \otimes (P_Y(B)W_B)) = \\ &\text{tr}(P_X(A)W_A) \cdot \text{tr}(P_Y(B)W_B) = p_{X,W_A}(A) \cdot p_{Y,W_B}(B) \end{aligned}$$

$p_{XY,W_A \otimes W_B}$ ist daher das Produktmaß der Wahrscheinlichkeitsmaße p_{X,W_A}, p_{Y,W_B} der Einzelsysteme, d.h. für *Produktzustände* sind die Wahrscheinlichkeitsverteilungen von Observablen unterschiedlicher Teilsysteme stochastisch unabhängig.

Ist ein Zustand $W \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ ein Produktzustand der Form $W = W_A \otimes W_B$, mit $W_A \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A)$ und $W_B \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_B)$ oder eine Mischung solcher Produktzustände $W = \sum_k p_k W_{A,k} \otimes W_{B,k}$, mit $W_{A,k} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A)$, $W_{B,k} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_B)$ und $p_k \in \mathbb{R}^+$, bezeichnet man ihn als *separabel*, andernfalls als *verschränkt*.

Einige Beispiele (mit $\psi_A, \varphi_A \in \mathcal{H}_A$; $\psi_B, \varphi_B \in \mathcal{H}_B$; $W_A = \frac{1}{3}P_{[\psi_A]} + \frac{2}{3}P_{[\varphi_A]}$, $W_B = \frac{1}{3}P_{[\psi_B]} + \frac{2}{3}P_{[\varphi_B]}$)

Zustand in $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$	Produkt	separabel	verschränkt
$\psi_A \otimes \psi_B$	✓	✓	
$\psi = \sqrt{\frac{1}{3}}\psi_A \otimes \psi_B + \sqrt{\frac{2}{3}}\varphi_A \otimes \varphi_B$			✓
$W = \frac{1}{3}P_{[\psi_A]} \otimes P_{[\psi_B]} + \frac{2}{3}P_{[\varphi_A]} \otimes P_{[\varphi_B]}$		✓	
$W_A \otimes P_{[\psi_B]} = \frac{1}{3}P_{[\psi_A]} \otimes P_{[\psi_B]} + \frac{2}{3}P_{[\varphi_A]} \otimes P_{[\psi_B]}$	✓	✓	

Nur verschränkte Zustände ermöglichen “nicht-lokale” Quanteneffekte wie die Verletzung der Bell-CHSH-Ungleichung (vgl. Kapitel “Die Bell-CHSH-Ungleichung und Bells Theorem”) durch nicht-klassische Korrelationen.

3.2 Zustand der Teilsysteme und partielle Spur

Für jeden Zustand $W \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ ist der Erwartungswert einer Observablen des Teilsystems $X \in \mathcal{O}(\mathcal{H}_A)$ gegeben durch¹⁷

$$\langle X \rangle = \text{tr}(W(X \otimes 1))$$

Es gibt aber zu jedem Zustand $W \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ einen Zustand $\widetilde{W} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A)$, sodass für alle Observablen $X \in \mathcal{O}(\mathcal{H}_A)$ gilt

$$\langle X \rangle = \text{tr}(\widetilde{W} X)$$

Der Operator \widetilde{W} ergibt sich durch *partielle Spurbildung* aus dem Operator W , es gilt

$$\widetilde{W} = \text{tr}_{\mathcal{H}_B}(W)$$

Man bezeichnet \widetilde{W} auch als auf das Teilsystem A *reduzierten Zustand*. Für einen Produktzustand $W = W_A \otimes W_B$ ist $\widetilde{W} = W_A$.

Für die Entropie des Zustands $W \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ gilt mit $\widetilde{W}_A = \text{tr}_{\mathcal{H}_B}(W)$ und $\widetilde{W}_B = \text{tr}_{\mathcal{H}_A}(W)$

$$S(W) \leq S(\widetilde{W}_A) + S(\widetilde{W}_B)$$

wobei für Produktzustände die Gleichheit gilt.

Für einen reinen Zustand des Gesamtsystems $\psi \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ gilt: Der reduzierte Zustand $\widetilde{W} = \text{tr}_{\mathcal{H}_B}(P_{[\psi]})$ ist genau dann rein, wenn ψ ein Produktzustand ist, d.h. $\psi = \psi_A \otimes \psi_B$ mit $\psi_A \in \mathcal{H}_A$, $\psi_B \in \mathcal{H}_B$. Für verschränkte reine Zustände des Gesamtsystems gibt es also keinen reinen Zustand des Teilsystems, der die korrekten Erwartungswerte für die Teilsystemobservablen liefert¹⁸

Beispiele wie oben (mit $\psi_A, \varphi_A \in \mathcal{H}_A$; $\psi_B, \varphi_B \in \mathcal{H}_B$; $W_A = \frac{1}{3}P_{[\psi_A]} + \frac{2}{3}P_{[\varphi_A]}$, $W_B = \frac{1}{3}P_{[\psi_B]} + \frac{2}{3}P_{[\varphi_B]}$)

¹⁷Wir beschränken und im Folgenden auf das Teilsystem A . Alle Ergebnisse gelten natürlich auch entsprechend für Teilsystem B .

¹⁸Dies zeigt auch, dass die Beschreibung quantenmechanischer Systeme durch reine Zustände nicht ausreicht.

Zustand in $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$	reduzierter Zustand in \mathcal{H}_A
$\psi_A \otimes \psi_B$	ψ_A
$\psi = \sqrt{\frac{1}{3}}\psi_A \otimes \psi_B + \sqrt{\frac{2}{3}}\varphi_A \otimes \varphi_B$	$W_A = \frac{1}{3}P_{[\psi_A]} + \frac{2}{3}P_{[\varphi_A]}$
$W = \frac{1}{3}P_{[\psi_A]} \otimes P_{[\psi_B]} + \frac{2}{3}P_{[\varphi_A]} \otimes P_{[\varphi_B]}$	$W_A = \frac{1}{3}P_{[\psi_A]} + \frac{2}{3}P_{[\varphi_A]}$
$W_A \otimes P_{[\psi_B]} = \frac{1}{3}P_{[\psi_A]} \otimes P_{[\psi_B]} + \frac{2}{3}P_{[\varphi_A]} \otimes P_{[\psi_B]}$	$W_A = \frac{1}{3}P_{[\psi_A]} + \frac{2}{3}P_{[\varphi_A]}$

Die Beispiele in der Tabelle zeigen auch, wie problematisch die Annahme ist, bei jedem System, das als Mischung reiner Zustände beschrieben wird, liege im Einzelexperiment in Wahrheit einer der Komponentenzustände vor - mit der entsprechenden Wahrscheinlichkeit, die dann rein epistemisch zu interpretieren wäre. Die Mischung W_A ist der auf das Teilsystem A reduzierte Zustand sowohl von ψ als auch von W . Die genannte Annahme ist aber nur mit dem Zustand W verträglich: Denn mit dem "wahren" Zustand ψ_A von Teilsystem A ist nur der "wahre" Zustand des Gesamtsystems $\psi_A \otimes \psi_B$ möglich, der eine Komponente der Mischung W ist, aber nicht des reinen Zustands ψ . Manche Autoren unterscheiden daher auch zwei Arten von Mischungen: Mischungen, die eine solche epistemische Interpretation zulassen (Gemenge, mixture of states, proper mixtures) und Mischungen, bei denen dies nicht der Fall ist (vgl. Mittelstaedt, 1998).

3.3 Wechselwirkung und Verschränkung

Ist ein abgeschlossenes Gesamtsystem aus zwei Teilsystemen mit den Hilberträumen $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$ zusammengesetzt, so besteht *keine Wechselwirkung* zwischen den Teilsystemen, wenn die Dynamik des Gesamtsystems im Hilbertraum $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ durch eine unitäre Transformation $U_t \in \mathcal{U}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ beschrieben werden kann, die als Produkt von unitären Transformationen der Teilsysteme dargestellt werden kann, d.h. es gibt $U_{t,A} \in \mathcal{U}(\mathcal{H}_A), U_{t,B} \in \mathcal{U}(\mathcal{H}_B)$, sodass

$$U_t = U_{t,A} \otimes U_{t,B}$$

mit $U_{t,A} = e^{-\frac{i}{\hbar}tH_A}$ und $U_{t,B} = e^{-\frac{i}{\hbar}tH_B}$. Dann gilt für alle Produktzustände $\psi_A(0) \otimes \psi_B(0) \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$

$$U_t(\psi_A(0) \otimes \psi_B(0)) = (U_{t,A} \otimes U_{t,B})(\psi_A(0) \otimes \psi_B(0)) = \psi_A(t) \otimes \psi_B(t)$$

Differenzieren liefert dann die Schrödingergleichung des Gesamtsystems

$$\frac{d}{dt} (\psi_A(t) \otimes \psi_B(t)) = -\frac{i}{\hbar}(H_A \otimes 1_B + 1_A \otimes H_B)\psi_A(t) \otimes \psi_B(t)$$

mit dem Hamiltonoperator

$$H = H_A \otimes 1_B + 1_A \otimes H_B$$

Wenn die Teilsysteme nicht wechselwirken, werden Produktzustände in Produktzustände überführt und separable Zustände bleiben separabel. Die Energie der Teilsysteme bleibt zeitlich konstant, genauso wie die Gesamtenergie. Dies ändert sich, wenn *Wechselwirkung* stattfindet. Wechselwirkende Systeme können Energie austauschen und Verschränkung produzieren. Die Zeitentwicklung eines Gesamtsystems $U_t \in \mathcal{U}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ lässt sich beim Vorliegen einer Wechselwirkung zwischen den Teilsystemen nicht mehr als Produkttransformation schreiben, d.h. es gibt *keine* $U_{t,A} \in \mathcal{U}(\mathcal{H}_A), U_{t,B} \in \mathcal{U}(\mathcal{H}_B)$, sodass $U_t = U_{t,A} \otimes U_{t,B}$. Es folgt: Es gibt Produktzustände, die durch die Transformation in verschränkte Zustände überführt werden, andernfalls könnte man eine Produkttransformation angeben. Der Hamiltonoperator des Gesamtsystems $H \in \mathcal{O}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ lässt sich dann als Summe schreiben

$$H = H_A \otimes 1_B + 1_A \otimes H_B + H_W$$

wobei $H_W = H - H_A \otimes 1_B - 1_A \otimes H_B \in \mathcal{O}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ per Definition die *Wechselwirkung* beschreibt. Die Energie der Teilsysteme ist dann i.A. keine Erhaltungsgröße. Es kann zwischen den Teilsystemen Energie ausgetauscht werden, die Gesamtenergie bleibt dabei erhalten.

3.4 Offene Systeme

Die Untersuchung *offener* Quantensysteme spielt eine wichtige Rolle. Eine Grundidee bei der theoretischen Behandlung ist es, das Gesamtsystem aus Umgebung, die mit dem Hilbertraum \mathcal{H}_U beschrieben wird, und offenem System \mathcal{H} im Hilbertraum $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_U$ zu betrachten, und aus der unitären

Dynamik $\{U_{t,t'} \in \mathcal{L}(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_U)\}_{t,t' \in \mathbb{R}}$ des Gesamtsystems mit einem Anfangszustand $W_0 \in \mathcal{S}(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_U)$ und partieller Spurbildung eine Beschreibung des offenen Systems alleine zu gewinnen

$$W : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{H}), t \mapsto W(t) = \text{tr}_{\mathcal{H}_U}(U_{0,t} W_0 U_{0,t}^\dagger) \quad (3.1)$$

Durch die Wechselwirkung eines offenen Quantensystems mit der Umgebung werden in der Regel reine Zustände in Mischungen überführt, ein Vorgang, den man auch als *Dekohärenz* bezeichnet.

Nimmt man an, dass der Anfangszustand ein Produktzustand $W_0 = W(0) \otimes W_U$ ist, so lässt sich $W(t)$ für jedes $t \geq 0$ in der Form schreiben

$$W(t) = \sum_k B_k(t) W(0) B_k^\dagger(t)$$

mit *Kraus-Operatoren* $B_k(t) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, für die gilt

$$\sum_k B_k(t) B_k^\dagger(t) = 1$$

Die Abbildung

$$T_t : \mathcal{S}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{H}), W \mapsto T_t(W) = \sum_k B_k(t) W B_k^\dagger(t) \quad (3.2)$$

beschreibt diese Dynamik (Man spricht von einer “quantum dynamical map”). Diese Abbildung ist i.A. nicht injektiv, die dadurch beschriebene Dynamik des Systems also *irreversibel*. Die Abbildung T_t kann auf den Vektorraum der Operatoren der Spurklasse $\mathcal{N}(\mathcal{H}_S) \subseteq \mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$ erweitert werden und ist dann linear, spurerhaltend und überführt positive Operatoren in Positive.¹⁹ Nimmt man weiterhin an, dass sich die Umgebung in einem Gleichgewichtszustand befindet, der durch die Wechselwirkung mit dem System nicht gestört wird, sowie die zeitliche Translationsinvarianz dieser Wechselwirkung, so bilden die Transformationen T_t eine *kommutative* Halbgruppe mit 1-Element, es gilt dann

$$T_{t+s} = T_t T_s$$

für alle $s, t \geq 0$. Man spricht von einer dynamischen Halbgruppe (*quantum dynamical semigroup*). Als Bewegungsgleichung (*master-equation*) kann in diesem Fall die *Lindblad-Gleichung* angegeben werden

$$\frac{d}{dt} W(t) = \frac{i}{\hbar} [W(t), H] + \sum_{k=1}^{N^2-1} \gamma_k (A_k W(t) A_k^\dagger - \frac{1}{2} A_k A_k^\dagger W(t) - \frac{1}{2} W(t) A_k A_k^\dagger) \quad (3.3)$$

Dabei sind für $k = 1, \dots, N^2 - 1$ die $\gamma_k \geq 0$ reelle Konstanten und die Operatoren $A_k \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$. Der erste Summand auf der rechten Seite gibt die unitäre Bewegung nach der v. Neumann-Gleichung mit dem Hamiltonoperator H an, der allerdings Zusatzerme gegenüber dem Hamiltonoperator des isolierten Systems enthalten kann, die Einwirkungen der Umgebung beschreiben. Die restlichen Summanden beschreiben *dissipative* Effekte, die die Irreversibilität der Dynamik in $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ ermöglichen. Genaueres findet sich z.B. in [Breuer and Petruccione, 2002].

4 Partikel: Ort, Impuls und Spin

Ein *Teilchen* ist ein System, dem ein Ortsvektor im 3-dimensionalen Raum zugeordnet ist, in kartesischen Koordinaten durch die Observablen $X, Y, Z \in \mathcal{O}$, sowie der zugehörige Impulsvektor, in kartesischen Koordinaten die Observablen $P_x, P_y, P_z \in \mathcal{O}$, wobei die *Heisenbergschen Vertauschungsrelationen* gelten²⁰

$$\begin{aligned} [X, P_x] &= [Y, P_y] = [Z, P_z] = i\hbar 1 \\ [X, Y] &= [X, Z] = [Y, Z] = [X, P_y] = [X, P_z] = [Y, P_z] = 0 \end{aligned}$$

¹⁹Vollständig positive, spurerhaltende Abbildungen (completely positive trace preserving CPTP maps) sind die Grundlage für die allgemeine Behandlung von Quantenoperationen mit offenen Systemen. Vollständige Positivität ist dabei gleichbedeutend mit der Existenz der angegebenen Kraus-Operatoren.

²⁰Die Relation $[X, P_x] = i\hbar 1$ ist in dieser Form durch lineare Operatoren im Hilbertraum mathematisch nicht erfüllbar (vgl. Kadison and Liu, 2014). Sie kann nur für nicht-überall definierte, unbeschränkte Operatoren insoweit erfüllt werden, dass sie für eine dichte Teilmenge des Hilbertraum (etwa die Schwartzschen Testfunktionen in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$) gilt, die in den Definitionsbereichen der beteiligten Operatoren enthalten ist. Eine mathematisch korrekte Formulierung wäre dann: Es gibt eine in \mathcal{H} dicht-liegende Teilmenge $D \subseteq \mathcal{D}(X) \cap \mathcal{D}(P_x)$, sodass für alle $\varphi \in D$ gilt $X(P_x \varphi) - P_x(X\varphi) = i\hbar \varphi$

4.1 Heisenbergsche Vertauschungsrelationen und Hamiltonoperator

Bei der Behandlung konkreter quantenmechanischer Systeme muss der Hilbertraum \mathcal{H} zusammen mit der Menge der Observablen \mathcal{O} angegeben werden. Beides leisten die Heisenbergrelationen für ein Teilchen: Die Observablen sind durch algebraische Verknüpfungen von Orts- und Impulsoperatoren gegeben, die Hilbertraumdarstellung dagegen durch $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ implizit vorgegeben v. Neumann [1931].

Aus den Vertauschungsrelationen folgt

$$\begin{aligned}-\frac{i}{\hbar}[X^n, P_x] &= nX^{n-1} \\ -\frac{i}{\hbar}[X, P_x^n] &= nP_x^{n-1}\end{aligned}$$

und damit für Polynome (oder in der passenden Darstellung differenzierbare Funktionen) f

$$\begin{aligned}-\frac{i}{\hbar}[f(X), P_x] &= \frac{\partial f}{\partial X} \\ -\frac{i}{\hbar}[X, f(P_x)] &= \frac{\partial f}{\partial P_x}\end{aligned}$$

Damit stehen die Vertauschungsrelationen in einem engen Zusammenhang mit der klassischen Poissonklammer. Historisch standen Heisenbergschen Vertauschungsrelationen am Anfang der Quantenmechanik²¹. Die grundlegenden Observablen wurden dabei zunächst in ihrer Matrixform behandelt.

Für die Begründer der QM waren die physikalischen Größen durch die klassische Physik vorgegeben. Energie, Masse, Impuls, Ladung waren durch klassische Theorien definiert und wurden mit Hilfe klassischer Instrumente gemessen, bevor es die QM gab. Die experimentell bestätigte Annahme, dass die Erhaltungssätze für diese Größen auch für Quantensysteme gelten, ermöglichte bilanzierende Messungen.

Die in den frühen Experimenten auftretenden Elektronen, Alphateilchen, Atome und Atomkerne wurden zunächst als *Massepunkte* der klassischen Mechanik behandelt - ein in der Makrophysik überaus erfolgreiches Konzept mit dem sowohl die Bewegung des Massenmittelpunkts eines Planeten als auch die eines fallenden Apfels auf der Erde beschrieben werden konnte, das aber grundsätzlich in der Mikrophysik scheiterte und nur in manchen Fällen gute Näherungen lieferte.

In der Hamiltonschen Form der klassischen Mechanik sind die Basisgrößen Orts- und Impulskoordinaten, die Dynamik wird durch die Hamiltonfunktion bestimmt, wobei die Bewegungsgleichungen mit Hilfe der Poissonklammern ausgedrückt werden können (vgl. Kapitel "Klassische statistische Mechanik"). Heisenbergs Vertauschungsrelationen und der Hamiltonoperator definieren in der QM ein "korrespondierendes" Konzept für *Teilchen*²².

Gruppentheoretische Methoden helfen, die Zusammenhänge zu verstehen. Die räumlichen und zeitlichen Symmetrien des Systems definieren eine Gruppe von Transformationen (z.B. Verschiebungen, Drehungen, Spiegelungen), deren unitäre Darstellung im Hilbertraum als Generatoren die grundlegenden Observablen²³ und ihre Vertauschungsrelationen definiert²⁴. Diese Symmetrien bilden ein gemeinsames Fundament zwischen klassischer Mechanik und QM.

Der für Beschreibung der Dynamik isolierter Systeme notwendige Hamiltonoperator hat für elementare Teilchensysteme oft die gleiche Form wie die Hamiltonfunktion der klassischen Mechanik, z.B. für ein Teilchen der Masse m in einem Kraftfeld, das durch eine Potentialfunktion $V : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben ist

$$H = \frac{1}{2m}P^2 + V = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) + V(X, Y, Z) \quad (4.1)$$

wobei man mitunter auch geschlossene Systeme mit zeitabhängiger Potentialfunktion V betrachtet. Für ein isoliertes System ist das Potential zeitlich konstant, für ein *freies Teilchen* ist es überall 0.

Aus den Vertauschungsrelationen folgt mit diesem Hamiltonoperator

$$[H, X] = \frac{P_x}{m} \quad (4.2)$$

$$[H, P_x] = -\frac{\partial V}{\partial X} \quad (4.3)$$

²¹implizit in Heisenbergs Pionierarbeit [1925], explizit in der Ausarbeitung der Matrizenmechanik von Born und Jordan [1925]

²²Auch *Felder* können in der *Quantenfeldtheorie* mit Hilfe von Vertauschungsrelationen für die Feldstärke- und die zugehörigen Impulsobservablen an jedem Raumpunkt eingeführt werden (kanonische Quantisierung).

²³Bei der Einführung des Hamiltonoperators im Abschnitt Dynamik haben wir diese Methode skizziert.

²⁴Eine elementare Darstellung dieser Zusammenhänge gibt z.B. Ballentine [1998]

4.2 Wellenmechanik und Schrödinger-Gleichung

Schrödinger führte in seiner Wellenmechanik Schrödinger [1926a,b,c,d] implizit den Hilbertraum der Wellenfunktionen $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ zur Darstellung der reinen Zustände eines Teilchens und Multiplikations- bzw. Differentialoperatoren auf diesem Raum zur Darstellung der Observablen ein:

$$\psi \rightarrow \psi(x, y, z)$$

$$X\psi \rightarrow x \cdot \psi(x, y, z)$$

$$P_x\psi \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\psi(x, y, z)$$

Man erkannte schnell, dass Schrödingers Differentialoperatoren algebraisch isomorph zu den Matrizen von Heisenberg, Born und Jordan waren. So folgt z.B. für den Kommutator zwischen X und P_x für jede differenzierbare Funktion ψ

$$(XP_x - P_x X)\psi = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x}\psi + i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x}\psi + i\hbar\psi + i\hbar x \frac{\partial}{\partial x}\psi = i\hbar\psi$$

d.h. die Heisenbergsche Vertauschungsrelation ist erfüllt. v. Neumann deckte die Hilbertraumstruktur [1927] der Quanten-/Wellenmechanik auf und zeigte [1931], dass alle anderen Darstellungen der Heisenbergschen Vertauschungsrelationen durch selbstadjungierte Operatoren im Hilbertraum unitäräquivalent zu der Schrödingerschen sind.

In der Dynamik betrachtet man zeitabhängige Wellenfunktionen

$$\psi(t) \rightarrow \psi(x, y, z, t)$$

Aus der abstrakten Schrödinger-Gleichung

$$\frac{d}{dt}\psi(t) = -\frac{i}{\hbar}H\psi(t)$$

ergibt sich dann mit (4.1) die partielle Differentialgleichung, die Schrödinger [1926d] aufgestellt hat. Für ein Teilchen im zeitlich konstanten Potential V lautet diese *zeitabhängige Schrödinger-Gleichung* dann

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}, t)$$

wobei $\mathbf{r} = (x, y, z)$, $\nabla = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$ und $\nabla^2 = (\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2})$ zur abkürzenden vektoriellen Schreibweise verwendeten werden. Das Betragsquadrat der Wellenfunktion kann als Wahrscheinlichkeitsdichte der Ortsobservablen interpretiert werden

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$$

d.h. das Integral von ρ über ein Volumen ergibt die Wahrscheinlichkeit für einen Teilchenort innerhalb dieses Volumens.

4.3 Kontinuitätsgleichung

Aus der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung folgt dann die sogenannte *Kontinuitätsgleichung*

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0$$

mit der vektoriellen *Stromdichte*

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi(\mathbf{r}, t)\nabla\psi^*(\mathbf{r}, t) - \psi^*(\mathbf{r}, t)\nabla\psi(\mathbf{r}, t))$$

die ein Ausdruck der Teilchen- bzw. Wahrscheinlichkeitserhaltung ist. Sie gilt daher mit anderen Definitionen von ρ, \mathbf{j} auch in der klassischen statistischen Mechanik eines Massepunkts.

4.4 Freies Teilchen und Gaußsche Wellenpakete

Für ein freies Teilchen²⁵ (Potential $V \equiv 0$) reduziert sich der Hamiltonoperator zu

$$H = \frac{1}{2m} P^2$$

Für eine Raumdimension (Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$) lautet die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t)$$

Lösungen sind eindimensionale Wellen

$$\psi(x, t) = ae^{\frac{i}{\hbar}(px - \frac{p^2}{2m}t)}$$

mit $a \in \mathbb{C}$, die allerdings nicht quadratintegrabel und daher auch keine Elemente des Hilbertraums $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ sind. Diese Wellen sind Eigenfunktionen für den Impuls p mit der Energie $e = \frac{1}{2m}p^2$ und erfüllen die von Einstein für Licht- und von de Broglie für Materiewellen postulierten Beziehungen für Frequenz ν ("nū")

$$e = h\nu$$

und Wellenlänge λ

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

mit $h = 2\pi\hbar$.

Beliebige Linearkombinationen dieser Wellen sind ebenfalls Lösungen der Schrödingergleichung wie z. B. *Gaußsche Wellenpakete*

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int a(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - \frac{p^2}{2m}t)} dp$$

mit

$$a(p) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_p}} e^{-\frac{(p-p_0^2)}{4\sigma_p^2}} e^{-\frac{i}{\hbar}px_0}$$

die quadratintegrabel und daher auch Elemente des Hilbertraums $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ sind. Ein solches Wellenpaket liefert sowohl für den Impuls als auch für den Ort Wahrscheinlichkeitsverteilungen in Form von Gaußschen Normalverteilungen

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(p, t) &= |a(p)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_p} e^{\frac{-(p-p_0^2)^2}{2\sigma_p^2}} \\ \rho(x, t) &= |\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x(t)} e^{\frac{-(x-x_0-\frac{p_0}{m}t)^2}{2\sigma_x(t)^2}} \end{aligned} \quad (4.4)$$

wobei sich die Ortsverteilung im Gegensatz zu Impulsverteilung mit der Zeit ändert. Erwartungswert und Streuung des Impulses sind p_0 und σ_p . Der Erwartungswert des Teilchenortes zum Zeitpunkt t ist

$$\langle X \rangle_t = x_0 + \frac{p_0}{m}t$$

²⁵Wie in der klassischen Mechanik kann auch in der QM die Bewegung des *Massenmittelpunkts* (*Schwerpunkts*) eines abgeschlossenen Mehrteilchensystems ohne externe Felder wie ein einzelnes freies Teilchen beschrieben werden.

Solche Gaußschen Wellenpakete entsprechen der Bewegung freier Teilchen in der klassischen Mechanik: Der Erwartungswert $\langle X \rangle_t$ bewegt sich gleichförmig mit der Geschwindigkeit p_0/m . Die Streuung wächst allerdings mit der Zeit, sodass die Verteilung “zerfließt”.

$$\sigma_X(t) = \frac{\hbar}{2\sigma_P} \sqrt{1 + \frac{4\sigma_P^4}{m^2\hbar^2} t^2}$$

Ist die Streuung des Wellenpaketes klein, dann ist die Wahrscheinlichkeit für einen Teilchenort in der Nähe des Erwartungswertes groß, sodass sich mit hoher Wahrscheinlichkeit quasi-klassische Bahnen für einzelne Teilchen ergeben, z.B.

$$p_{\psi,X}([\langle X \rangle_t - 3\sigma_X(t), \langle X \rangle_t + 3\sigma_X(t)]) = 0,997$$

Zum Zeitpunkt $t = 0$ gilt $\sigma_x(0) = \frac{\hbar}{2\sigma_P}$. Dies ist untere Grenze für σ_x , wenn man σ_p als gegeben annimmt und die Unbestimmtheitsrelation (1.3) berücksichtigt. Man kann damit auch schreiben

$$\sigma_X(t) = \sigma_X(0) \sqrt{1 + \frac{\sigma_P^2}{m^2\sigma_X(0)^2} t^2}$$

Der gleiche Ausdruck ergibt sich in der klassischen statistischen Mechanik für eine Gaußsche Normalverteilung im Phasenraum, die sich nach der Liouville-Gleichung bewegt. Die Marginalverteilung der Orte folgt dabei ebenfalls (4.4), die Marginalverteilung der Impulse bleibt zeitlich konstant (vgl. Volovich 2009). Im Gegensatz zur QM sind aber beliebig kleine Streuungen σ_X und σ_P möglich.

Die Geschwindigkeit des Zerfließens der Verteilung ist allerdings grundsätzlich zwischen Elementarteilchen und makroskopischen Partikeln höchst unterschiedlich. Bei jeweils minimaler Impulsstreuung $\sigma_P = \frac{\hbar}{2\sigma_X(0)}$ gilt:

- Ein Elektron mit der Masse $m = 9.1 \cdot 10^{-31}\text{kg}$ und der Anfangsstreuung des Ortes $\sigma_x(0) = 0.1\text{nm} = 10^{-10}\text{m}$ (etwa ein Atomdurchmesser) verdoppelt σ_x in der Zeit $t = 2,99 * 10^{-16}\text{s}$.
- Ein kleines Sandkorn (Durchmesser 0.1 mm) mit der Masse $m = 1\mu\text{g} = 10^{-6}\text{kg}$ und der Anfangsstreuung $\sigma_x(0) = 1\mu\text{m} = 10^{-6}\text{m}$ (1% vom Durchmesser) verdoppelt σ_x in der “astronomischen” Zeitspanne $t = 3,28 * 10^{16}\text{s} \approx 10^9\text{a}$.

MI: Eine mögliche Präpariervorrichtung zur experimentellen Überprüfung der quantenmechanischen Beschreibung makroskopischer Systeme ist z.B. ein Gewehr, die Kugeln sind die zu untersuchenden Systeme. In Abhängigkeit von Zielrichtung und Art der Munition (sowie einiger anderer Parameter wie Temperatur etc.) wird der Zustand einer Kugel präpariert, wenn man das Gewehr abfeuert. Zielscheiben können als Detektor verwendet werden. Die Verteilung der Einschüsse gibt Aufschluss über den präparierten Zustand.

Für diese Experimente gibt es keinen gravierenden Unterschied zwischen klassischer und quantenmechanischer Beschreibung: Letztere verwendet eine Mischung aus Gaußschen Wellenpaketen, erstere Gaußsche Normalverteilungen im Phasenraum, die sich nach der Liouvillegleichung bewegen. Beide Beschreibungen liefern für die Verteilung der Aufschlagsorte die gleichen Resultate. Der theoretische Grenzfall für die maximal erreichbare Präzision der Versuchsapparatur ist allerdings unterschiedlich: In der QM wird dann der Massenmittelpunkt der Kugel durch ein Gaußsches Wellenpaket mit minimaler Orts-/Impulsstreuung, wie von der Unbestimmtheitsrelation vorgeben, beschrieben. In der KM würde ein Punktmaß verwendet, das sich auf einer klassischen Bahn bewegt. In der Praxis sind diese Grenzfälle unerreichbar.

Dennoch sind bei einem “guten” Gewehr die Streuungen klein genug, sodass für eine praktische Anwendung die gradlinige Bahn über “Kimme und Korn” als Beschreibung ausreicht. Diese Beschreibung ist *deterministisch* und ermöglicht es, das Gewehr als zuverlässiges Werkzeug z.B. für die Jagd zu verwenden. Sowohl im Vergleich zur quantenmechanischen als auch zur klassisch-statischen Beschreibung liegt eine Vereinfachung vor, die nur eine Teilmenge der Ereignisse behandelt, die mit einer *Wahrscheinlichkeit nahe bei 1* eintreten.

Die quantenmechanische Beschreibung beinhaltet Zustände und Observablen, die in Experimenten mit Gewehrkugeln nicht präpariert bzw. gemessen werden können - zumindest bisher. Dank des technischen Fortschritts konnten immerhin bei der Bewegung großer Moleküle mit einer Masse von mehr als 6000 Wasserstoffatomen quantenmechanische Interferenzeffekte im Experiment nachgewiesen werden (s. Abschn. 4.7). Vielleicht ist dies eines Tages auch mit Gewehrkugeln möglich.

4.5 Ehrenfest-Theorem, klassischer Grenzfall und Dekohärenz

Der Erwartungswert bewegt sich nicht nur bei Gaußschen Wellenpaketen für freie Teilchen auf einer klassischen Bahn. In Abhängigkeit vom Potential und der Form des Wellenfunktion gibt es auch in anderen Fällen eine mehr oder weniger exakte Übereinstimmung mit der klassischen Teilchenbahn.

Aus der Heisenbergschen Bewegungsgleichung (2.3) kann sehr einfach durch Erwartungswertbildung die *Ehrenfestsche Gleichung* gewonnen werden

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_t = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle_t + \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle_t$$

die die zeitliche Entwicklung des Erwartungswertes einer beliebigen Observablen $A \in \mathcal{O}$ angibt und deshalb natürlich auch im Schrödingerbild gilt. Mit dem zeitlich konstanten Hamiltonoperator $H = \frac{1}{2m}P^2 + V$ folgt, wenn V nur von den Ortskoordinaten abhängt, für den Erwartungswert des Ortes $\langle X \rangle_t$ eines Teilchens in einer Raumdimension aus den Heisenbergschen Vertauschungsrelationen mit (4.2)

$$m \frac{d}{dt} \langle X \rangle_t = \langle P \rangle_t$$

was der klassischen Beziehung $p = m\dot{x}$ entspricht. Weiterhin folgt mit (4.3)

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle X \rangle_t = -\langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle_t$$

Diese Ehrenfestsche Gleichung kann man als Newtonsche Bewegungsgleichung für einen Massepunkt interpretieren, der sich zu jedem Zeitpunkt $t \in \mathbb{R}$ am quantenmechanischen Erwartungswert des Ortes $\langle X \rangle_t$ befindet, wenn $-\langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle_t$ die Kraft angibt, die auf diesen wirkt. Dies erfordert allerdings, wenn klassisches und quantenmechanisches System mit dem gleichen Potential beschrieben werden, dass für alle $t \in \mathbb{R}$

$$\frac{\partial V}{\partial x}(\langle X \rangle_t) = -\langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle_t$$

Dies ist aber dann der Fall, wenn das Potential V ein höchstens quadratisches Polynom der Ortskoordinaten ist. Mit $V(x) = a + bx + cx^2$ mit $a, b, c \in \mathbb{R}$ gilt dann nämlich für jeden Zustand $W \in \mathcal{S}$

$$\langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle_W = \langle b + 2cX \rangle_W = b + 2c\langle X \rangle_W = \frac{\partial V}{\partial x}(\langle X \rangle_W)$$

d.h. der Erwartungswert des Teilchenorts bewegt sich für jeden Anfangszustand exakt auf der klassischen Bahn. Beispiele sind freie Teilchen, Teilchen in einem homogenen Kraftfeld oder der harmonischen Oszillatoren.

Aber auch für Potentiale V , die diese Bedingung nicht erfüllen, kann die Bewegung des Erwartungswertes des Teilchenorts für eine gewisse Zeitspanne (*Ehrenfestzeit*) näherungsweise auf klassischen Bahnen verlaufen, solange nämlich näherungsweise gilt

$$\frac{\partial V}{\partial x}(\langle X \rangle_t) \approx \langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle_t$$

Dies ist bei hinreichend kleinen Wellenpaketen der Fall, wenn innerhalb eines Volumens, für das die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens nahe bei 1 liegt, das Potential “gut” durch ein quadratisches Polynom approximiert werden kann. Dies gilt zum Beispiel im Zentralfeld, wenn ein kleines Wellenpaket weit genug vom Zentrum entfernt ist (Planeten- bzw. Satellitenorbits, freier Fall an der Erdoberfläche). Das mögliche Zerfließen des Wellenpakets lässt allerdings diese Näherung im Lauf der Zeit immer schlechter werden, wobei ähnlich wie bei den oben behandelten freien Teilchen diese Zeitspanne bei makroskopischen Körpern astronomisch groß sein kann.

Klassischer Grenzfall Punktmechanik

Betrachtet man die QM als universelle Theorie, die auch makroskopische Körper beschreibt, so sollte deren Beschreibung mittels der klassischen Mechanik eine gute Näherung an die umfassendere und genauere Beschreibung durch die QM darstellen. Auch wenn es viele Einzelresultate gibt, die diese Ansicht stützen, fehlt bisher doch eine allgemein akzeptierte, lückenlose und umfassende Darstellung dieses klassischen Grenzfalls (s. Landsman, 2005).

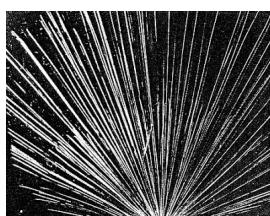
Der Ehrenfestsche Satz und die Ehrenfestsche Gleichung bilden eine wichtige Brücke zur klassischen Mechanik. Sind die oben aufgeführten Bedingungen erfüllt, so beschreibt die klassische Punktmechanik die Bewegung des Massenmittelpunkts eines makroskopischen Körpers genauso wie die QM die Bewegung des quantenmechanischen Erwartungswerts des Teilchenorts. Für Wellenpakete mit hinreichend kleiner Streuung liefern dann beide Theorien praktisch, d.h. mit den makroskopisch erreichbaren Messgenauigkeiten, die gleichen Vorhersagen für Ort und Impuls des Teilchens - zumindest in experimentell überprüfbaren Zeitspannen.

Auch in der klassischen statistischen Mechanik gilt der Ehrenfest-Satz für den Erwartungswert des Ortes [Ballentine, 1998]. Wie in der QM folgt der Erwartungswert des Ortes der Bahn eines Massepunkts, wenn das Potential höchstens quadratisch von den Ortskoordinaten abhängt. Wiebe and Ballentine [2005] haben darauf hingewiesen, dass dabei die Übereinstimmung noch weiter gehen kann: Auch in Fällen, in denen sich der Erwartungswert in beiden Theorien nicht auf der Bahn eines Massepunkts bewegt, können Wahrscheinlichkeitsverteilungen und Erwartungswerte für Ort und Impuls zwischen QM und der klassischen statistischen Mechanik übereinstimmen (vgl. auch Hajicek, 2015).

Dekohärenz

Wenn man Wellenpakete als quantenmechanische Grundlage der klassischen Beschreibung der Massenmittelpunktsbewegung makroskopischer Körper betrachtet, stellt sich natürlich die Frage, warum in der makroskopischen Natur nur solche Zustände beobachtet werden. Eine Antwort auf diese Frage gibt die *Dekohärenztheorie*: Es ist praktisch unmöglich, einen makroskopischen Körper von der Umgebung zu isolieren. Selbst im Ultrahochvakuum oder der Heliosphäre im interplanetaren Raum gibt es mehr als 10^4 massive Teilchen pro cm^3 , die mit einem makroskopischen Körper kollidieren, hinzu kommen die Photonen der elektromagnetischen Strahlung. Je größer das Körpervolumen um so höher ist die Kollisionsrate. Die theoretische Behandlung als offenes System zeigt dann, dass alle Wellenfunktionen eines Teilchens innerhalb einer kurzen Zeitspanne (*Dekohärenzzeit*) in Mischungen aus "scharf" lokalisierten Wellenpaketen übergehen, die sich jeweils auf quasi-klassischen Bahnen bewegen (vgl. Schlosshauer 2004, sowie Eisert 2004, Qureshi 2012)²⁶.

MI: Dieser Effekt wurde im Prinzip schon in der Frühzeit der QM beobachtet und analysiert (vgl. Mott, 1929 und Heisenberg, 1930). Die Theorie des Alpha-Zerfalls ergibt für ein vom radioaktiven Kern emittiertes Alphateilchen eine Wellenfunktion in Form einer auslaufenden Kugelwelle. In der Wilsonschen Nebelkammer werden aber mehr oder weniger gradlinige Teilchenspuren in radialer Richtung beobachtet, wie das Bild zeigt.



Die unkontrollierte Wechselwirkung des Alphateilchens mit der Wasserdampf-Umgebung führt zu Dekohärenz: Die Kugelwelle, die das isolierte Alphateilchen beschreibt, geht (durch partielle Spurbildung am Gesamtsystem Alphateilchen-Wasserdampf) in eine Mischung aus Wellenpaketen über, die sich gradlinig in radialer Richtung fortbewegen (vgl. Figari and Teta [2012, 2014]).

²⁶Diese Antwort der Dekohärenztheorie ist allerdings nicht unumstritten (vgl. Ballentine 2008).

Ähnlich wie schon in Abschn. 3.4 skizziert, kann der Massenmittelpunkt eines Teilchens in einer solchen Umgebung als offenes System durch eine Lindblad-Gleichung beschrieben werden, für die (Joos et al., 2003, S. 70) in einer Raumdimension folgende Form angeben

$$\frac{d}{dt} W(t) = \frac{i}{\hbar} [W(t), H] + \lambda [X, [X, W(t)]]$$

wobei λ eine von der Größe des Teilchens abhängige Dekohärenzrate darstellt. Mit dem Hamiltonoperator $H = \frac{1}{2m} P^2 + V$ des isolierten Teilchens gelten selbst in diesem Fall für die Bewegung der Erwartungswerte von Ort und Impuls die Ehrenfestschen Gleichungen (Joos et al., 2003, S. 88)

$$m \frac{d}{dt} \langle X \rangle_t = \langle P \rangle_t$$

$$\frac{d}{dt} \langle P \rangle_t = - \langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle_t$$

sodass alle Überlegungen aus Abschnitt 4.5 zur Anwendung kommen können.

4.6 Harmonischer Oszillator

Auch wenn der Hamiltonoperator des eindimensionalen harmonischen Oszillators

$$H = \frac{1}{2m} P^2 + \frac{m\omega^2}{2} X^2$$

mit $V(X) = \frac{m\omega^2}{2} X^2$ und reellen Konstanten $m, \omega > 0$ die Bedingungen des Ehrenfesttheorems exakt erfüllt und der Erwartungswert des Ortes sich daher für alle Lösungen der Schrödinger-Gleichung auf einer klassischen Bahn bewegt, gibt es doch eine fundamentale Abweichung zur klassischen Mechanik: die möglichen Energiewerte sind “gequantelt”. Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi(x, t)$$

wird gelöst durch

$$\psi_n(x, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} e_n t\right) \varphi_n(x)$$

wobei φ_n für $n = 0, 1, \dots$ Eigenfunktionen des Hamiltonoperators zum Eigenwert $e_n \in \mathbb{R}$ sind. Sie haben die Form

$$\varphi_n(x) = c_n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) h_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)$$

wobei h_n die hermitischen Polynome $h_0(y) = 1, h_1(y) = 2y, h_2(y) = 4y^2 - 2, \dots$ und $c_n \in \mathbb{R}$ Normierungsfaktoren darstellen. Die zugehörigen Eigenwerte sind gerade

$$e_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik ist die minimale Energie also nicht 0 sondern $\frac{\hbar\omega}{2}$. Der Grundzustand ψ_0 ist ein Gaußsches Wellenpaket. Für alle ψ_n ruht der Erwartungswert des Ortes im Ursprungspunkt, d.h. für alle t gilt $\langle X \rangle_t = 0$ und $\langle P \rangle_t = 0$. Superpositionen der Eigenfunktionen des Hamiltonoperators der Form

$$\chi_c(x) = \exp\left(-\frac{|c|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^n}{\sqrt{n!}} \varphi_n(x)$$

mit beliebigem $c = |c| e^{i\alpha} \in \mathbb{C}$ mit $c \neq 0$, bezeichnet man als *kohärente Zustände*. Bei den zugehörigen Lösungen der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\tilde{\chi}_c(x, t) = \exp\left(-\frac{|c|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x, t)$$

vollführen die Erwartungswerte für Ort und Impuls eine klassische Schwingungsbewegung

$$\langle X \rangle_t = a |c| \cos(\omega t - \alpha), \langle P \rangle_t = am\omega \sin(\omega t - \alpha)$$

mit der Amplitude $a = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} |c|$ und der Frequenz $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$, wobei für die Streuungen gilt

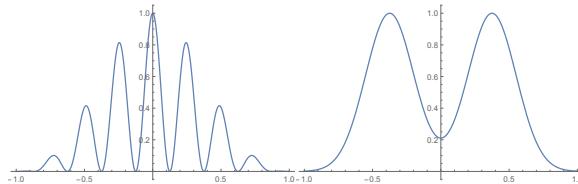
$$\sigma_X(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \sigma_P(t) = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \Rightarrow \sigma_X(t)\sigma_P(t) = \frac{\hbar}{2}$$

Diese Zustände beschreiben also Wellenpakete minimaler Unschärfe für Ort und Impuls, die sich auf klassischen Bahnen bewegen und nicht im Lauf der Zeit zerfließen.

4.7 Wellen und Interferenzen

Eine weitere Abweichung zur klassischen statistischen Mechanik ergibt sich durch das mögliche Auftreten von *Interferenzen*, die es bei klassischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Teilchen nicht gibt. In der klassischen Physik kennt man Interferenzen nur von Wellen, sie treten z.B. beim Doppelspaltexperiment auf.²⁷

Das folgende Bild zeigt diese Effekte für ein Gaußsches Wellenpaket (links) und eine entsprechende klassische Gaußsche Normalverteilung (rechts) im Phasenraum, wenn beide mit relativ “scharfem” Impuls²⁸ den Doppelspalt passieren und in einer gewissen Entfernung auf einen Detektionsschirm treffen.



Aufgetragen ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für das Auftreffen des Teilchens in dem entsprechenden Bereich des Schirms. Das entstehende Interferenzmuster kann man mit Hilfe klassischer Wellen erklären, wenn man deren Wellenlänge mittels der Beziehung von de Broglie aus dem Impuls berechnet $\lambda = \frac{h}{p}$ (s. “freies Teilchen”) und die Wahrscheinlichkeitsdichte als Betragsquadrat der Schwingungsamplitude deutet.

Im Formalismus der QM hängt das Auftreten der Interferenzen mit den Additionsregeln für Wahrscheinlichkeiten zusammen (vgl. Feynman et al., 1965). Für ein freies Teilchen bewegt sich die klassische Wahrscheinlichkeitsverteilung für den Ort des Teilchen vor dem Spalt ähnlich wie die Quantenmechanische. Am Doppelspalt ändert sich das.

Im klassischen Fall bilden sich nach dem Doppelspalt zwei Teilverteilungen $\rho_1(r, p, t), \rho_2(r, p, t)$ im Phasenraum heraus, die sich teilweise überlappen. Für die Wahrscheinlichkeit des Teilchenorts zur Zeit t in einem kleinen Raumbereich A hinter dem Doppelspalt gilt dann

$$p(A, t) = \int I_A(\rho_1(r, p, t) + \rho_2(r, p, t)) d\Gamma = \int I_A \rho_1(r, p, t) d\Gamma + \int I_A \rho_2(r, p, t) d\Gamma = p_1(A, t) + p_2(A, t)$$

wobei I_A die Indikatorfunktion für den Raumbereich A und $p_1(A, t) = \int I_A \rho_1(r, p, t) d\Gamma, p_2(A, t) = \int I_A \rho_2(r, p, t) d\Gamma$ die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten angeben, dass das Teilchen durch den jeweiligen Spalt gegangen ist und sich dann in A befindet. Die Teilverteilungen $\rho_1(r, p, t), \rho_2(r, p, t)$ können auch zur Beschreibung des Systems verwendet werden, wenn jeweils ein Spalt geschlossen ist.

²⁷Historisch war bekanntlich Young’s Doppelspaltexperiment mit Licht von 1806 mit ausschlaggebend für die Akzeptanz der Wellentheorie des Lichts (anstelle von Newton’s Teilchentheorie), die dann ca. 100 Jahr später durch Einsteins Theorie der Lichtquanten wieder revidiert wurde.

²⁸d.h. entsprechend großer Streuung des Ortes

In der QM teilt sich das entsprechende Gaußsche Wellenpaket hinter dem Doppelspalt ebenso in zwei Teilwellenfunktionen $\psi_1(r, t), \psi_2(r, t)$, die zur Gesamtwellenfunktion addiert werden. Für die Wahrscheinlichkeit gilt dann aber

$$p(A, t) = \int I_A |\psi_1(r, t) + \psi_2(r, t)|^2 dV = \int I_A |\psi_1|^2 dV + \int I_A |\psi_2|^2 dV + \int I_A 2\text{Re}(\psi_1 \psi_2^*) dV = p_1(A, t) + p_2(A, t) + i_{1,2}(A, t)$$

d.h. zu den Wahrscheinlichkeiten $p_1(A, t) = \int_A |\psi_1(r, t)|^2 dV, p_2(A, t) = \int_A |\psi_2(r, t)|^2 dV$ wird noch ein *Interferenzterm* $i_{1,2}(A, t)$ addiert, der negativ sein kann. Dies hat zur Folge, dass die Wahrscheinlichkeit $p(A, t)$ auch Null sein kann, wenn beide Teilwellenpakete eine positive Wahrscheinlichkeit ergeben, d.h. $p_1(A, t) > 0$ und $p_2(A, t) > 0$.

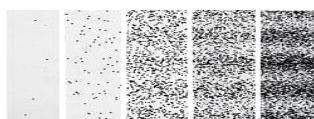
Es hängt allerdings von etlichen Parametern ab, ob diese Interferenzen in Erscheinung treten. Wenn sich $\psi_1(r, t)$ und $\psi_2(r, t)$ beispielsweise nicht nennenswert überlappen (d.h. es gilt überall $\psi_1(r, t) + \psi_2(r, t) \approx \psi_1(r, t)$ oder $\psi_1(r, t) + \psi_2(r, t) \approx \psi_2(r, t)$), verschwindet der Interferenzterm. Bei hinreichend "kleinen" Wellenpaketen und "großen" Spalten liefert daher die quantenmechanische Beschreibung keine grundsätzlich anderen Ergebnisse als die klassische statistische Mechanik.

Ein quantenmechanisches Teilchen kann anstelle der *Superposition* der beiden Teilwellenfunktionen $\psi_1(r, t) + \psi_2(r, t)$ auch eine *Mischung* $s_1 P_{[\psi_1(t)]} + s_2 P_{[\psi_2(t)]}$ als Zustand haben. Auch in diesem Fall gibt es keinen Interferenzterm und es gilt

$$p(A, t) = \text{tr}(I_A(s_1 P_{[\psi_1(t)]} + s_2 P_{[\psi_2(t)]})) = p_1(A, t) + p_2(A, t)$$

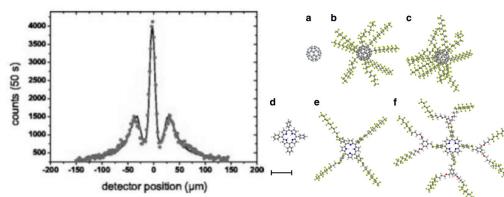
Im nächsten Kapitel wird gezeigt, wie solche Mischungen auftreten können, wenn durch eine Messung festgestellt wird, durch welchen Spalt das Teilchen geht. s_1, s_2 geben dann die Wahrscheinlichkeit an, dass das Teilchen den Spalt 1 bzw. Spalt 2 passiert hat. Der gleiche Übergang kann auch durch *Dekohärenz* stattfinden.

MI: Will man die Interferenzen im Experiment sichtbar machen, so muss das Einzelexperiment, dass ein Teilchen den Doppelspalt passiert und in einer gewissen Entfernung detektiert wird, oft genug wiederholt werden, so dass man in der Häufigkeitsverteilung der Detektionen die Interferenzen erkennt. Das folgende Bildsequenz zeigt die langsame Herausbildung des Interferenzmusters in der Häufigkeitsverteilung der Teilcheneinschläge bei einem Elektronenexperiment:



Mit Licht wurde das Doppelspaltexperiment von T. Young schon 1803 durchgeführt, allerdings ohne dass die "Körnigkeit" der Verteilung in Erscheinung trat, was erst mit Hilfe moderner Photonendetektoren bei geringer Strahlungsintensität ermöglicht wird. Das Doppelspaltexperiment mit Elektronen wurde erstmalig von Jönsson [1961] durchgeführt. Die Beugung von Elektronenstrahlen durch Interferenzen an einem Kristallgitter wurde allerdings schon von Davisson and Germer 1927 demonstriert.

In jüngerer Zeit werden solche Interferenzen mit moderner Präzisionstechnik bei immer größeren Objekten nachgewiesen z.B. C_{60} -Molekülen (Abbildung a, Arndt et al. [1999]). 2011 lag der experimentelle Rekord bei Molekülen mit Massen von bis zu 6910 Wasserstoffatommassen (Abbildung c) und Größen bis zu 6×10^{-9} m (Abbildung f), d.h. mehr als das 100fache des Bohrschen Atomradius (Arndt et al., 2011).



Diese Interferenzen verschwinden allerdings, wenn man die Moleküle erhitzt, sodass auf dem Weg durch die Apparatur thermische Photonen emittiert werden (Hackermüller et al., 2004). Dies kann als experimentelle Bestätigung der Dekohärenztheorie gedeutet werden (Schlosshauer, 2004).

4.8 Teilchen mit Spin

Auch der *Spin* eines Teilchens ist eine genuin quantenmechanische Observable, zu der es in der klassischen Punktmechanik keine korrespondierende Größe gibt²⁹. Der Spin (vgl. Ballentine [1998], Kapitel 7) ist eine vektorielle Größe mit drei räumlichen Komponenten

$$\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$$

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$$

für die die folgenden Vertauschungsrelationen gelten

$$\{S_x, S_y\} = i\hbar S_z, \{S_y, S_z\} = i\hbar S_x, \{S_z, S_x\} = i\hbar S_y$$

$$\{S_x, S^2\} = \{S_y, S^2\} = \{S_z, S^2\} = 0$$

Das Spektrum der Spinoperatoren ist für ein *Spin-s-Teilchen* gegeben durch

$$\sigma(S_x) = \sigma(S_y) = \sigma(S_z) = \{-\hbar s, -\hbar s + 1, \dots + \hbar s\}, \sigma(S^2) = \{\hbar^2 s(s+1)\}$$

wobei die Zahl s für *Bosonen* (Higgsboson, Photon, ...) ganzzahlig $s \in \{0, 1, 2, \dots\}$ und für *Fermionen* (Elektron, Neutrino, Quark,...) halbzahlig $s \in \{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots\}$ ist. Bei zusammengesetzten Systemen wie z.B. Protonen, Neutronen, Atome ergibt sich der Gesamtspin nach gewissen Regeln aus den Komponenten. Die im Stern-Gerlach-Experiment verwendeten Silberatome verhalten sich im Grundzustand wie Spin-1/2-Teilchen, gewisse Heliumatome (Orthohelium) wie Spin-1-Teilchen.

Der Spin wird als eigenes System im Hilbertraum \mathbb{C}^{2s+1} beschrieben, ein Spin-s-Teilchen daher im Tensorprodukt aus Teilchenhilbertraum und Spinhilbertraum z.B. in der Schrödingerdarstellung $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{2s+1}$ durch Wellenfunktionen mit $2s+1$ Komponenten

$$(\psi_{-s}(\mathbf{r}, t), \psi_{-s+1}(\mathbf{r}, t), \dots, \psi_{+s}(\mathbf{r}, t))$$

Man bezeichnet solche $2s+1$ -komponentigen Wellenfunktion auch als *Spinoren*. Die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Teilchenort ergibt sich durch Summation der Betragsquadrate aller Komponenten

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=-s}^s |\psi_k(\mathbf{r}, t)|^2$$

Der Hamiltonoperator hat die Form einer $(2s+1) \times (2s+1)$ -Matrix. Der Teilchenspin ist mit einem magnetischen Moment verbunden, das beim Hamiltonoperator eines Teilchens im elektromagnetischen Feld berücksichtigt werden muss. Für Spin-1/2-Teilchen wird die entsprechende Schrödingergleichung für die 2-komponentige Wellenfunktion auch als Pauligleichung bezeichnet.

Spin 1/2

Für den Spin 1/2 ist der Hilbertraum \mathbb{C}^2 und repräsentiert somit das einfachst-mögliche quantenmechanische System, für das es nur jeweils zwei orthogonale Zustandsvektoren gibt. Das Spektrum der Spinkomponenten umfasst daher gerade zwei verschiedene Werte $\pm \frac{1}{2}\hbar$. Solche einfachen Systeme werden gern als Beispiel verwendet.

Auch die Polarisation von Photonen kann auf diese Weise beschrieben werden. Da entsprechende Experimente technisch wesentlich einfacher durchzuführen sind, als Stern-Gerlach-Experimente mit Spin-1/2-Teilchen, werden viele grundlegenden Experimente der Quantenphysik mit Photonen durchgeführt. Die theoretische Behandlung wirft jedoch das Problem auf, dass Photonen als masselose Teilchen, die sich mit Lichtgeschwindigkeit bewegen, relativistisch behandelt werden

²⁹Der gruppentheoretische Zusammenhang mit der Rotationssymmetrie zeigt, dass es sich um einen Drehimpuls handelt. Das klassische Analogon wäre daher der Eigendrehimpuls kleiner Kugeln, der aber für Massepunkte wenig Sinn ergibt.

müssen, was den Rahmen der nicht-relativistischen QM sprengt. Die abstrakte Behandlung der Polarisation als Quantenbit in \mathbb{C}^2 hilft darüber hinweg, verdeckt aber manche schwierige Frage (z.B. bzgl. des Teilchenorts).

Die Observablen, die die Spinkomponenten eines Spin-1/2-Teilchens beschreiben, werden durch 2x2-Matrizen dargestellt

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Lässt man den Faktor $\frac{\hbar}{2}$ weg, so erhält man die *Paulimatrizen*, die oftmals mit $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ bzw. in der Quanteninformatik einfach mit X, Y, Z bezeichnet werden, alle die Eigenwerte ± 1 haben und deren Quadrat die 2x2-Einheitsmatrix ist

$$S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Die Eigenvektoren des Operators S_z sind

$$\zeta_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \zeta_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Da die Spinkomponenten S_x, S_y, S_z nicht miteinander kommutieren, gibt es keine gemeinsamen Eigenvektoren. Für die Eigenvektoren von S_x gilt z.B.

$$\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\zeta_+ + \zeta_-)$$

$$\xi_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\zeta_+ - \zeta_-)$$

Bei einem Spinsystem im Zustand ζ_+ , für dessen z -Komponente des Spins der Wert $+\frac{\hbar}{2}$ streufrei ist, gilt für die Wahrscheinlichkeit der Werte $+\frac{\hbar}{2}$ bzw. $-\frac{\hbar}{2}$ für die x -Komponente des Spins daher

$$p_{S_x, \zeta_+} \left(+\frac{\hbar}{2} \right) = |\langle \zeta_+, \xi_+ \rangle|^2 = \frac{1}{2} = p_{S_x, \zeta_+} \left(-\frac{\hbar}{2} \right)$$

Die Streuung von S_x ist deshalb im Zustand ζ_+ maximal und gleich $\frac{1}{4}$.

Spin 1

Für den Spin 1 ist der Hilbertraum \mathbb{C}^3 . Das Spektrum der Spinkomponenten ist

$$\sigma(S_x) = \sigma(S_y) = \sigma(S_z) = \{-\hbar, 0, \hbar\}, \quad \sigma(S^2) = \{2\hbar^2\}$$

Die Spinkomponenten selbst werden durch 3x3-Matrizen dargestellt

$$S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Die Quadrate der Komponenten sind zwar keine Einheitsmatrizen, aber sie kommutieren paarweise

$$\{S_x^2, S_y^2\} = \{S_y^2, S_z^2\} = \{S_z^2, S_x^2\} = 0$$

Stern-Gerlach-Apparatur

Im oben skizzierten Stern-Gerlach-Experiment werden elektrisch neutrale Atome verwendet, deren Massenmittelpunkt mit einem Wellenpaket beschrieben werden kann, das sich gleichförmig gradlinig in y -Richtung bewegt. Der Spin von Atomen im Grundzustand ergibt sich aus den Elektronenspins der Atomhülle: z.B. können Kalium- oder Silberatome im Grundzustand als Spin-1/2-Teilchen beschrieben werden, gewisse Heliumatome (metastabile Orthohelium-Zustände) als Spin-1-Teilchen. Der Hamiltonoperator für die Bewegung eines Atoms im Magnetfeld $\mathbf{B}(x, y, z)$ hat dann die Form

$$H = \frac{1}{2m} P^2 + g \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(x, y, z)$$

mit einer reellen Konstante g . Eine vereinfachte Überschlagsrechnung lässt die Strahlaufspaltung im Stern-Gerlach-Experiment verstehen: Zeigt des Magnetfeld in z -Richtung, so ergibt sich für den Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2m} P^2 + g S_z B_z$$

mit der z -Komponente des Magnetfelds $B_z \in \mathbb{R}$. Man sieht leicht, dass Produktzustände aus Teilchen-Wellenpaket $\varphi(x, y, z, t)$ und einer Spin-Eigenfunktion ζ_{s_z} von S_z je nach Eigenwert s_z (für Spin 1/2 $s_z \in \{-\frac{\hbar}{2}, +\frac{\hbar}{2}\}$, für Spin 1 $s_z \in \{-\hbar, 0, +\hbar\}$ in positiver z -Richtung ($s_z > 0$) oder negativer z -Richtung ($s_z < 0$) oder gar nicht ($s_z = 0$) abgelenkt werden, denn es ergibt sich dann

$$H(\varphi(x, y, z, t) \otimes \zeta_{s_z}) = \left(\frac{1}{2m} P^2 + g S_z B_z \right) \varphi(x, y, z, t) \otimes \zeta_{s_z}$$

woraus für den Erwartungswert des Ortes nach der Ehrenfestschen Gleichung folgt

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle Z \rangle_t = -s_z g \left\langle \frac{\partial B_z}{\partial z} \right\rangle$$

also eine Beschleunigung proportional zum Wert der Spinkomponente $-s_z$. Bei Mischungen aus solchen Wellenpaketen mit unterschiedlichen s_z -Werten ergibt sich dann eine entsprechende Aufspaltung des Atomstrahls. Superpositionen werden im nächsten Kapitel behandelt.

Literatur

- M. Arndt, O. Nairz, J. Vos-Andreae, C. Keller, G. v. d. Zouw, and A. Zeilinger. Wave-particle duality of C₆₀ molecules. *Nature*, 401, 1999.
- M. Arndt, S. Eibenberger, S. Gerlich, and K. Hornberger. Quantum interference of large organic molecules. *Nature Communications*, 2, 2011.
- L. E. Ballentine. *Quantum Mechanics: A modern Development*. World Scientific, Singapore, 1998.
- L. E. Ballentine. Classicality without Decoherence: A Reply to Schlosshauer. *Found. Phys.*, 38, 2008.
- M. Born. Quantenmechanik der Stoßvorgänge. *Z. Physik*, 38, 1926.
- M. Born and P. Jordan. Zur Quantenmechanik. *Z. Physik*, 34, 1925.
- H.-P. Breuer and F. Petruccione. *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press, Oxford, 2002.
- P. Busch, M. Grabowski, and P. J. Lahti. *Operational Quantum Physics*. Springer-Verlag, Berlin, 1995.
- P. Busch, T. Heinonen, and P. Lahti. Heisenberg's Uncertainty Principle. *Phys. Rep.* 452, 2007.
- C. M. Caves, C. A. Fuchs, and R. Schack. Quantum probabilities as Bayesian probabilities. *Phys. Rev. A*, 65, 2002.
- G. D'Agostini. *Bayesian Reasoning in Data Analysis*. World Scientific, Singapore, 2003.
- C. Davisson and L. H. Germer. *Phys. Rev.*, 30, 1927.
- W. M. de Muynck. *Foundations of Quantum Mechanics, an Empiricist Approach*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2002.
- P. A. M. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics, 4th ed.* Oxford university press, 1958.
- J. Eisert. Exact decoherence to pointer states in free open quantum systems is universal. *Phys. Rev. Lett.*, 92, 2004.
- R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands. *The Feynman Lectures on Physics, Vol. III*. Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts, 1965.
- R. Figari and A. Teta. Emergence of classical trajectories in quantum systems: the cloud chamber problem in the analysis of Mott (1929). 2012.
- R. Figari and A. Teta. *Quantum Dynamics of a Particle in a Tracking Chamber*. Springer-Verlag, Berlin, 2014.
- C. A. Fuchs, N. D. Mermin, and R. Schack. An Introduction to QBism with an Application to the Locality of Quantum Mechanics. *Am. J. Phys.*, 82, 2014.
- W. Gerlach and O. Stern. Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld. *Z. Physik*, 9, 1922.
- D. Gillies. *Philosophical Theories of Probability*. Routledge, London, 2000.
- L. Hackermüller, K. Hornberger, B. Brezger, A. Zeilinger, and M. Arndt. Decoherence of matter waves by thermal emission of radiation. *Nature*, 427, 2004.
- P. Hajicek. Quantum models of classical systems. *J. Phys. Conf. Ser.* 626, 2015.
- W. Heisenberg. Über die quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. *Z. Physik*, 33, 1925.
- W. Heisenberg. Über den anschaulichen Gehalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik. *Z. Physik*, 43, 1927.
- W. Heisenberg. *Physikalische Prinzipien der Quantentheorie*. Hirzel, 1930.
- W. Heisenberg. *Physik und Philosophie*. Hirzel, Stuttgart, 1959.
- E. T. Jaynes. *Probability Theory, the Logic of Science*. Cambridge University Press, Cambridge, 2003.

- C. Jönsson. Elektroneninterferenzen an mehreren künstlich hergestellten Feinspalten. *Z. Physik*, 161, 1961.
- E. Joos, H. D. Zeh, C. Kiefer, D. Giulini, J. Kupsch, and O. Stamatescu. *Decoherence and the Appearance of a Classical Word in Quantum Theory*. Springer-Verlag, Berlin, 2003.
- R. V. Kadison and Z. Liu. The Heisenberg Relation - Mathematical Formulations. *SIGMA* 10, 9, 2014.
- N. P. Landsman. Between classical and quantum. *arXiv:quant-ph/0506082*, 2005.
- G. Ludwig. *Foundations of Quantum Mechanics I*. Springer-Verlag, Berlin, 1983.
- G. Ludwig. *Foundations of Quantum Mechanics II*. Springer-Verlag, Berlin, 1985a.
- G. Ludwig. *An Axiomatic Basis for Quantum Mechanics, Vol. 1*. Springer-Verlag, Berlin, 1985b.
- G. Ludwig. *Die Grundstrukturen einer physikalischen Theorie - 2. überarbeitete Auflage*. Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- P. Mittelstaedt. *The Interpretation of Quantum Mechanics and the Measurement Process*. Cambridge University Press, 1998.
- N. F. Mott. The wave mechanics of alpha-ray tracks. *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, 126, 1929.
- E. Nelson. *Dynamical Theories of Brownian Motion*. Princeton University Press., Princeton, 1967.
- M. Nielsen and I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2000.
- W. Pauli. *Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik*. Springer-Verlag, new edition 1990, Berlin, 1933.
- T. Qureshi. Decoherence, Time Scales and Pointer States. *Physica A* 391, 2012.
- E. Rutherford. The scattering of Alpha and Beta Particles by Matter and the Structure of the Atom. *Phil. Mag., Series 6*, 21, 1911.
- M. Schlosshauer. Decoherence, the measurement problem, and interpretation of quantum mechanics. *Rev. Mod. Phys.* 76, 2004.
- E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem, 1. Mitt. *Annalen der Physik*, 79, 1926a.
- E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem, 2. Mitt. *Annalen der Physik*, 79, 1926b.
- E. Schrödinger. Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen. *Annalen der Physik*, 79, 1926c.
- E. Schrödinger. Quantisierung als Eigenwertproblem, 4. Mitt. *Annalen der Physik*, 81, 1926d.
- J. v. Neumann. Mathematische Begründung der Quantenmechanik. *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen*, 1927.
- J. v. Neumann. Die Eindeutigkeit der Schrödingerschen Operatoren. *Mathematische Annalen*, 1931.
- J. v. Neumann. *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Springer-Verlag, Berlin, 1932.
- C. F. v. Weizsäcker. *Aufbau der Physik*. Carl Hanser Verlag, München, 1985.
- V. S. Varadarajan. Probability in Physics and a Theorem on Simultaneous Observability. *Comm. Pure Appl. Math.*, 15, 1962.
- V. S. Varadarajan. *Geometry of Quantum Theory, Vol. I*. D. van Nostrand Co. Inc., Princeton, New Jersey, 1968.
- I. V. Volovich. Randomness in Classical Mechanics and Quantum Mechanics. *arXiv:0910.5391 [quant-ph]*, 2009.
- S. Weinberg. *The Quantum Theory of Fields, Vol. I*. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- S. Weinberg. Quantum Mechanics Without State Vectors. *arXiv:1405.3483 [quant-ph]*, 2014.
- G. Wentzel. Zwei Bemerkungen über die Zerstreuung korpuskularer Strahlen als Beugungserscheinung. *Z. f. Physik*, 40, 1926.
- N. Wiebe and L. E. Ballentine. Quantum Mechanics of Hyperion. *Phys. Rev. A*, 72, 2005.